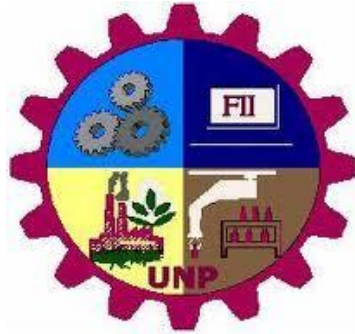


**UNIVERSIDAD NACIONAL DE PIURA
FACULTAD DE INGENIERIA INDUSTRIAL
ESCUELA PROFESIONAL DE INGENIERIA INDUSTRIAL**



TESIS

**“OPTIMIZACIÓN PARAMÉTRICA MEDIANTE LA SIMULACIÓN DE LAS
VARIABLES DE OPERACIÓN: TEMPERATURA, PRESIÓN Y FLUJO DE VINO Y
VAPOR EN LA COLUMNA DE DESTILACIÓN DE MAPLE ETANOL”**

PRESENTADO POR:

Br. EMANUEL ORLANDO CHIRITO CUNYA

ASESORADA POR:

DR. NESTOR JAVIER ZAPATA PALACIOS

PIURA – PERU

2017

UNIVERSIDAD NACIONAL DE PIURA

FACULTAD DE INGENIERIA INDUSTRIAL

ESCUELA PROFESIONAL DE INGENIERIA INDUSTRIAL



TESIS

**"OPTIMIZACIÓN PARAMÉTRICA MEDIANTE LA SIMULACIÓN DE LAS
VARIABLES DE OPERACIÓN: TEMPERATURA, PRESIÓN Y FLUJO DE
VINO Y VAPOR EN LA COLUMNA DE DESTILACIÓN DE MAPLE
ETANOL"**

APROBADO:

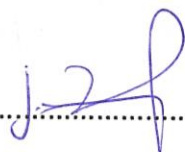

Dr. MIGUEL JIMÉNEZ CARRIÓN MG.
PRESIDENTE – JURADO CALIFICADOR
ING. NESTOR CASTILLO BURGOS MSc.
VOCAL – JURADO CALIFICADOR
ING. DANIEL CRUZ GRANDA.
SECRETARIO – JURADO CALIFICADOR

PIURA – PERÚ

2017

**TESIS PRESENTADA COMO REQUISITO PARA OPTAR
EL TITULO DE INGENIERO INDUSTRIAL**

ASESOR Dr. Néstor Zapata Palacios

..... 

TESISTA Br. Emanuel Orlando Chirito Cunya

..... 



UNIVERSIDAD NACIONAL DE PIURA
FACULTAD DE INGENIERÍA INDUSTRIAL
DECANATO



ACTA DE SUSTENTACIÓN DE TESIS

Los Miembros del Jurado Calificador de la Tesis denominada: «OPTIMIZACIÓN PARAMETRICA MEDIANTE LA SIMULACIÓN DE LAS VARIABLES DE OPERACIÓN: TEMPERATURA, PRESIÓN Y FLUJO DE VINO Y VAPOR EN LA COLUMNA DE DESTILACIÓN DE MAPLE ETANOL», presentado por el señor **CHIRITO CUNYA EMANUEL ORLANDO**, Bachiller de la Escuela Profesional en **Ingeniería Industrial**, asesorado por el Dr. **NÉSTOR ZAPATA PALACIOS MSc.**, Reunidos para la sustentación de ésta y luego de escuchar su exposición y las respuestas a las preguntas formuladas, la decláran:



Con el Calificativo:

APROBADA
BUENO

En consecuencia el sustentante se encuentra **apto** para recibir el título profesional de **INGENIERO INDUSTRIAL**, conforme a Ley.

Piura, 29 de enero del 2016

Dr. MIGUEL JIMÉNEZ CARRIÓN MG.
PRESIDENTE - JURADO CALIFICADOR

ING. NESTOR CASTILLO BURGOS MSc.
VOCAL - JURADO CALIFICADOR

ING. DANIEL CRUZ GRANDA.
SECRETARIO - JURADO CALIFICADOR

CAMPUS UNIVERSITARIO - MIRAFLORES - CASTILLA - PIURA - APARTADO 295 PIURA
TELEF. 285197 - CENTRAL TELEFÓNICA 285254 ANEXO 4042

DEDICATORIA

Al creador de todas las cosas, el que me ha dado fortaleza en momentos difíciles y momentos de mucha felicidad, porque deposité mi confianza en él y nunca me ha fallado, con toda humildad que de mi corazón puede emanar y gracias a su voluntad puedo hoy dedicarte esta tesis, GRACIAS DIOS por ayudarme a entender y a encontrar mi destino, y a la VIRGEN MARÍA por su protección de madre.

A mis padres, ORLANDO y SOCORRO por formarme con buenos sentimientos, hábitos y valores, por su sacrificio, su amistad, su amor, sus sabios consejos y protección en mi vida.

A mis hermanos, KATIA Y GABRIEL, JONATAN, mi cuñado CRISTHIAN por acompañarme y motivarme a compartir con ellos mis logros.

A mi tía ESPERANZA y JOHANI, por su cariño y apoyo durante mis estudios universitarios.

A mis suegros ARTURO Y BASILIA, mi cuñado BORIS por sus sabios consejos.

Y en especial a mi esposa ROMINA, mis amados Hijos SHANELLA DAYANA Y CRISTHOPER IMANOL, por ser mi motivación diaria por forjar un futuro mejor y demás familiares y amistades que apoyaron de alguna manera en la culminación de este trabajo.

AGRADECIMIENTO

Expreso mi agradecimiento a la Escuela de Ingeniería Industrial de la Universidad Nacional de Piura por permitir desarrollarme profesionalmente, así como a todos los profesores que me transmitieron sus conocimientos y experiencias.

A mi asesor Dr. Néstor Zapata Palacios, por su apoyo desinteresado y motivación constante en el desarrollo de ésta Tesis.

RESUMEN

El presente trabajo aborda la Optimización Paramétrica mediante simulación de las variables de operación, tales como la Temperatura, Presión y Flujo de Vino y Vapor en la columna mostera del sistema de destilación de MAPLE ETANOL. Las simulaciones fueron realizadas con el simulador de procesos químicos Hysys 3.0.1, para lo cual se contó con datos de entrada correspondientes tanto a condiciones de operaciones reales, así como a variables de diseño, brindados por los Departamentos de Control de Calidad y Producción, respectivamente. El proceso simulado involucra la unidad de operación de la columna mostera, conformado por una bomba centrífuga, un intercambiador de casco y tubos y una columna de destilación de platos perforados. Las restricciones de las simulaciones fueron la composición molar de etanol en la vinaza caliente, a la salida de la columna mostera y el consumo energético del proceso.

Se realizaron ocho análisis de sensibilidad a fin de determinar el impacto que se tiene al variar en rangos razonables los parámetros tales como presión, flujo y temperatura de entrada de vino, sobre el consumo energético y sobre la concentración de etanol en la vinaza que sale de la columna mostera.

Finalmente se determina que los parámetros de operación óptimos para la operación de la columna mostera son: 94°C para el ingreso de vino a la columna, 1.0 bar de presión de entrada de vino a la bomba centrífuga y 1.1 bar de presión de entrada de vino a la columna mostera.

Palabras claves: Etanol, columna mostera, sistema de destilación

ABSTRACT

The present work deals with parametric optimization by simulation of the operating variables, such as temperature, pressure and wine flow in the sample column of the MAPLE ETHANOL distillation system. The simulations were carried out using the Hysys 3.0.1 chemical process simulator, for which input data were available for both actual operating conditions and design variables provided by the Quality and Production control departments, respectively. The simulated process involves the operation unit of the sample column, consisting of a centrifugal pump, a hull and tube exchanger and a column for the distillation of perforated plates. Simulation restrictions were the molar composition of ethanol in the hot vinasse, at the exit of the sample column and the energy consumption of the process.

Eight sensitivity analyzes were carried out to determine the impact of varying in reasonable ranges parameters such as pressure, flow and temperature of wine inlet, on energy consumption and on the concentration of ethanol in the vinasse leaving from The column mostera.

Finally, it is determined that the optimum operating parameters for the operation of the sample column are: 94 ° C for ingress of wine to the column, 1.0 bar of wine inlet pressure to the centrifugal pump and 1.1 bar of inlet pressure of Came to the column mostera.

Keywords: Ethanol, Column mostera, Distillation System.

ÍNDICE

| | |
|---|----------|
| PRESENTACIÓN..... | i |
| ACTA DE SUSTENTACIÓN..... | ii |
| DEDICATORIA..... | iii |
| AGRADECIMIENTO..... | iv |
| RESUMEN..... | v |
| ABSTRACT..... | vi |
| ÍNDICE..... | vii |
| CAPITULO I: ASPECTOS GENERALES | 1 |
| 1.1. ANTECEDENTES..... | 2 |
| 1.1.1 ANTECEDENTES HISTÓRICOS DE LOS BIOCOMBUSTIBLES EN EL MUNDO..... | 2 |
| 1.1.2. ANTECEDENTES REFERENTES AL INICIO DE PRODUCCIÓN DE ETANOL EN EL PERÚ..... | 4 |
| 1.1.2.1. Caña Brava: | 4 |
| 1.1.2.2. Maple Etanol: | 4 |
| 1.2. MATERIAS PRIMAS..... | 4 |
| 1.3. TECNOLOGÍAS PARA LA OBTENCIÓN DE ETANOL..... | 5 |
| 1.3.1. Procesos que modifican la volatilidad etanol – agua..... | 5 |
| 1.3.2. Procesos que utilizan el principio de la solvatación | 5 |
| 1.3.3. Procesos que combinan la modificación de volatilidad y la solvatación | 6 |
| 1.3.4. Procesos que modifican el equilibrio de fases a presión reducida | 6 |
| 1.3.5. Procesos basados en el diámetro cinético de las moléculas | 6 |

| | |
|---|----|
| 1.4. DESCRIPCION DEL PROCESO | 8 |
| 1.4.1. PREPARACIÓN DE LA MATERIA PRIMA..... | 8 |
| 1.4.2. EXTRACCIÓN DEL JUGO | 8 |
| 1.4.3. EVAPORACIÓN DEL JUGO | 9 |
| 1.4.4. FERMENTACIÓN..... | 9 |
| 1.4.5. DESTILACIÓN..... | 9 |
| 1.4.6. DESHIDRATACION..... | 9 |
| 1.5. ETANOL | 11 |
| 1.5.1. DEFINICIÓN | 11 |
| 1.5.2. VENTAJAS DEL ETANOL | 11 |
| 1.5.3. DESVENTAJAS DEL ETANOL..... | 11 |
| 1.6. EQUILIBRIO DE FASES..... | 13 |
| 1.6.1 POTENCIAL QUÍMICO. ECUACIÓN DE GIBBS-DUHEM..... | 14 |
| 1.6.2. OTRAS MAGNITUDES DE USO EN EL EQUILIBRIO ENTRE FASES | 16 |
| 1.6.3. FUGACIDAD..... | 16 |
| 1.6.4. PARA UN GAS IDEAL..... | 16 |
| 1.6.5. PARA UNA SUSTANCIA EN SOLUCIÓN:..... | 17 |
| 1.6.6. CONDICIÓN EN EL EQUILIBRIO:..... | 17 |
| 1.6.7. DETERMINACIÓN DE FUGACIDADES EN GASES PUROS: | 18 |
| 1.6.8. COEFICIENTE DE FUGACIDAD: | 19 |
| 1.6.9. DETERMINACIÓN DE LA FUGACIDAD EN MEZCLAS GASEOSAS:..... | 19 |
| 1.6.10. DETERMINACIÓN DE LA FUGACIDAD EN LÍQUIDOS PUROS: | 21 |
| 1.6.11. FUGACIDAD EN SOLUCIONES LÍQUIDAS: | 22 |
| 1.6.12. ALGUNAS DEFINICIONES IMPORTANTES: | 22 |
| 1.6.13. RELACIONES DE EQUILIBRIO EN MEZCLAS L-V: | 24 |

| | |
|---|-----------|
| 1.6.14. MEZCLA LÍQUIDA Y VAPOR IDEALES:..... | 24 |
| 1.6.15. PRESIONES MODERADAS, SOLUCIONES IDEALES | 26 |
| 1.6.16. SOLUCIONES LÍQUIDAS NO IDEALES:..... | 27 |
| 1.7. SIMULACIÓN | 30 |
| 1.8. DISEÑO DE PROCESOS QUÍMICOS | 30 |
| 1.9. SIMULACIÓN DE PROCESOS QUÍMICOS..... | 31 |
| 1.9.1. SELECCIÓN DEL PAQUETE TERMODINÁMICO:..... | 32 |
| 1.9.2. OPCIONES TERMODINÁMICAS | 34 |
| 1.9.2.1. El Enfoque Uniforme..... | 34 |
| 1.9.2.2. El Modelo Líquido | 35 |
| 1.9.2.3. Modelo de la Solución Regular | 36 |
| 1.9.2.4. Modelo de Van Laar | 37 |
| 1.9.2.5. Modelo de Wilson | 37 |
| 1.9.2.6. Modelo UNIQUAC | 37 |
| 1.9.2.7. Modelo NRTL | 38 |
| 1.9.3 CRITERIO DE SELECCIÓN: | 40 |
| 1.9.3.1 Clasificación de Componentes: | 40 |
| CAPITULO II: MATERIAL DE ESTUDIO, METODO Y TECNICA | 46 |
| 2.1. MATERIAL DE ESTUDIO. | 46 |
| 2.2.MÉTODOS Y TÉCNICAS | 47 |
| 2.2.1.Método..... | 47 |
| 2.2.2.Técnica: | 47 |
| 2.3. VARIABLES..... | 48 |
| 2.4. RESTRICCIONES | 48 |
| 2.5. PROCEDIMIENTO | 48 |

| | |
|--|-----------|
| CAPITULO III: SIMULACION Y OPTIMIZACION..... | 50 |
| 3.1. SIMULACIÓN DE LA COLUMNA MOSTERA | 50 |
| 3.2. DATOS DE ENTRADA | 50 |
| 3.3. SIMULACIÓN DE LA OPERACIÓN DE LA COLUMNA MOSTERA | 52 |
| 3.3.1. Ingreso de componentes y selección del paquete termodinámico..... | 52 |
| 3.3.2. Datos de Entrada para la bomba | 53 |
| 3.3.3. Ingreso de datos para el intercambiador de calor vino/vinaza..... | 55 |
| 3.3.4. Ingreso de datos para la columna mostera..... | 58 |
| 3.3.5. Corrida Inicial realizada con los datos de entrada..... | 60 |
| 3.4. COMPARACIÓN DE RESULTADOS | 61 |
| 3.5. OPTIMIZACIÓN MEDIANTE ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD | 61 |
| 3.5.1. Análisis de la influencia de la presión del vino sobre la composición de vinaza y el gasto energético en la columna mostera | 62 |
| 3.5.2. Análisis de la influencia de la presión del vino sobre el gasto energético de la bomba y del reboiler | 63 |
| 3.5.3. Análisis de la influencia de la temperatura del vino sobre la composición de la vinaza y el gasto energético del reboiler | 64 |
| 3.5.4. Análisis conjunto de la presión y temperatura del vino sobre la composición de la vinaza..... | 65 |
| 3.5.5. Análisis conjunto de la presión y temperatura del vino sobre el consumo energético del reboiler | 66 |
| 3.5.6. Análisis del flujo de vino sobre la composición de la vinaza y sobre el consumo energético..... | 67 |
| 3.5.7. Análisis conjunto del flujo de vino y la temperatura sobre la composición de la vinaza..... | 68 |

| | |
|--|----|
| 3.5.8 Análisis conjunto del flujo de vino y la temperatura sobre el consumo energético del reboiler..... | 69 |
| 3.6. CORRIDA FINAL REALIZADA CON LOS PARÁMETROS ÓPTIMOS DE OPERACIÓN | 70 |
| 3.6.1 Datos de entrada | 70 |
| 3.6.1.1 Ingreso de componentes y selección del paquete termodinámico | 70 |
| 3.6.1.2. Ingreso de componentes y selección del paquete termodinámico | 71 |
| 3.6.2. Ingreso de datos para la bomba | 71 |
| 3.6.3. Ingreso de datos para el intercambiador de calor vino/vinaza..... | 73 |
| 3.6.4. Ingreso de datos para la columna mostera..... | 76 |
| 3.6.5. Corrida Final realizada con los parámetros óptimos. | 78 |
| CONCLUSIONES | 79 |
| RECOMENDACIONES | 81 |
| BIBLIOGRAFÍA | 82 |
| ANEXOS | 84 |

ÍNDICE DE TABLAS, FIGURAS Y CUADROS

TABLAS

| | |
|---|----|
| Tabla 1. Clasificación de los compuestos puros..... | 40 |
| Tabla 2. Clasificación de los compuestos de acuerdo a las desviaciones de la ley de Raoult..... | 41 |
| Tabla 3. Clasificación del tipo de mezclas según la aplicabilidad de los modelos..... | 42 |
| Tabla 4. Precisión esperada para los modelos líquidos..... | 43 |
| Tabla 5. Diagrama de árbol para la selección del modelo termodinámico..... | 43 |
| Tabla 6. Diagrama de árbol de compuestos polares..... | 44 |
| Tabla A.1 Parámetros de Operación del vino..... | 84 |
| Tabla A.2 Parámetros de Operación de la Flegma..... | 85 |
| Tabla A.3 Parámetros de Operación de la vinaza..... | 86 |

FIGURAS

| | |
|---|----|
| Fig. 1 Diagrama de bloques para la obtención de etanol anhidro..... | 10 |
| Fig. 2 Diagrama de equipos de la destilería Maple Etanol..... | 12 |
| Fig. 3. Esquema que muestra la secuencia llevada a cabo en el diseño de procesos..... | 31 |
| Fig. 4. Sistema de Estudio: Unidad de Operación de Col. Mostera..... | 47 |
| Fig. 5. Pantalla que muestra el ingreso de los componentes..... | 52 |
| Fig. 6. Pantalla que muestra la selección del paquete termodinámico a utilizar..... | 53 |

| | |
|---|----|
| Fig. 7. Pantalla que muestra las conexiones para la bomba de vino..... | 53 |
| Fig. 8. Pantalla que muestra las condiciones de entrada y salida del vino..... | 54 |
| Fig. 9. Pantalla que muestra la composición de los componentes a la entrada..... | 54 |
| Fig. 10. Pantalla que muestra las especificaciones técnicas de diseño de la bomba. | 55 |
| Fig. 11. Pantalla que muestra las conexiones del intercambiador..... | 55 |
| Fig. 12. Pantalla que muestra el ingreso de las caídas de presión en casco y tubos. | 56 |
| Fig. 13. Pantalla que muestra las condiciones de entrada y salida del equipo..... | 56 |
| Fig. 14. Pantalla el ingreso de variables de diseño del intercambiador..... | 57 |
| Fig. 15. Pantalla que muestra las variables de diseño del intercambiador..... | 57 |
| Fig. 16. Pantalla que muestra las variables de diseño del intercambiador..... | 58 |
| Fig. 17. Pantalla que muestra las conexiones para la columna mostera..... | 58 |
| Fig. 18. Pantalla que muestra las condiciones de ingreso del vino a la columna..... | 59 |
| Fig. 19. Pantalla que muestra el ingreso de la relación de reflujo, flujo de destilado y fracción volumen de etanol en la vinaza..... | 59 |
| Fig. 20. Pantalla que muestra el ingreso de variables de diseño de la columna mostera..... | 60 |
| Fig. 21. Pantalla que muestra la corrida inicial de la unidad de operación-Col. Mostera..... | 60 |
| Fig. 22. Caso de Estudio n° 1..... | 62 |
| Fig. 23. Caso de Estudio n° 2..... | 63 |
| Fig. 24. Caso de Estudio n° 3..... | 64 |
| Fig. 25. Caso de Estudio n° 4..... | 65 |
| Fig. 26. Caso de Estudio n° 5..... | 66 |

| | |
|---|----|
| Fig. 27. Caso de Estudio n° 6..... | 67 |
| Fig. 28. Caso de Estudio n° 7..... | 68 |
| Fig. 29. Caso de Estudio n° 8..... | 69 |
| Fig. 30. Ingreso de componentes..... | 70 |
| Fig. 31. Pantalla que muestra la selección del paquete termodinámico..... | 71 |
| Fig. 32. Pantalla que muestra las conexiones para la bomba de vino..... | 71 |
| Fig. 33. Pantalla que muestra las condiciones de entrada y salida del vino..... | 72 |
| Fig. 34. Pantalla que muestra la composición de los componentes a la entrada..... | 72 |
| Fig.35. Pantalla que muestra las especificaciones técnicas de diseño de la bomba..... | 73 |
| Fig. 36. Pantalla que muestra las conexiones del intercambiador..... | 73 |
| Fig. 37. Pantalla que muestra el ingreso de las caídas de presión en casco y tubos..... | 74 |
| Fig. 38. Pantalla que muestra las condiciones de entrada y salida del equipo..... | 74 |
| Fig. 39. Pantalla el ingreso de variables de diseño del intercambiador..... | 75 |
| Fig. 40. Pantalla que muestra las variables de diseño del intercambiador..... | 75 |
| Fig. 41. Pantalla que muestra las variables de diseño del intercambiador..... | 76 |
| Fig. 42. Pantalla que muestra las conexiones y datos para la columna mostera..... | 76 |
| Fig. 43. Pantalla que muestra las condiciones de ingreso del vino a la columna..... | 77 |
| Fig. 44. Pantalla que muestra el ingreso de la relación de reflujo, flujo de destilado y fracción volumen de etanol en la vinaza..... | 77 |
| Fig. 45. Pantalla que muestra el ingreso de variables de diseño de la columna mostera..... | 78 |

| | |
|--|----|
| Fig. 46. Pantalla que muestra la corrida final de la unidad de operación-Col. mostera..... | 78 |
|--|----|

CUADROS

| | |
|--|----|
| Cuadro 1. Parámetros de Operación para la simulación..... | 50 |
| Cuadro 2. Variables de diseño para la bomba..... | 51 |
| Cuadro 3. Variables de diseño para el intercambiador de calor..... | 51 |
| Cuadro 4. Variables de diseño para la columna mostera..... | 52 |
| Cuadro 5. Comparación de parámetros reales vs. Obtenidos por simulación..... | 61 |
| Cuadro 6. Parámetros de entrada utilizados para la corrida final..... | 70 |
| Cuadro A.1 Parámetros de Operación para la simulación..... | 86 |
| Cuadro A.2. Variables de diseño para la bomba..... | 87 |
| Cuadro A.3. Variables de diseño para el intercambiador de calor..... | 87 |
| Cuadro A.4. Variables de diseño para la columna mostera..... | 87 |

CAPÍTULO I

ASPECTOS GENERALES

INTRODUCCIÓN

La sociedad moderna acepta como natural la continua necesidad de combustibles fósiles como el petróleo y gas natural, y los beneficios que nos brindan son evidentes, por otro lado también es consciente del terrible daño que estos ocasionan, como por ejemplo, la emisión de gases contaminantes que afectan fuertemente al medio ambiente, la fluctuación de precios que tienen incidencia económica y por ultimo al ser recursos no renovables están destinados a extinguirse con el pasar de los años por ende nos vemos en la imperiosa necesidad de buscar nuevas fuentes de energía, una de las alternativas es el uso de combustibles ecológicos o biocombustibles, específicamente el bioetanol es una buena opción, independientemente de la materia prima con que se elabore.(Olujic, Z., and Futamura, k., 2006).

Actualmente el biocombustible más importante es el etanol, producto renovable obtenido a partir de cultivos bioenergéticos y de biomasa. El etanol carburante es utilizado para oxigenar la gasolina, permitiendo una mejor oxidación de los hidrocarburos y reduciendo las emisiones de monóxido de carbono, compuestos aromáticos y compuestos orgánicos volátiles a la atmosfera (Casanova J. 2002).

El uso de alcohol etílico como combustible no genera una emisión neta de CO₂ sobre el ambiente debido a que el CO₂ producido en los motores durante la combustión y durante el proceso de obtención del etanol es nuevamente fijado por la biomasa mediante el proceso de fotosíntesis.

Entre los cultivos bioenergéticos más usados para la producción de etanol la caña de azúcar es la materia prima más usada en países tropicales como Brasil e India. Por otro lado en Norte américa y Europa, el etanol carburante se obtiene del almidón presente en el maíz y los cereales (Wheals A. E. Basso L.C., Alves D., Amorim H., 1999).

Por otro lado, los procesos de separación en biotecnología se conocen como “downstream” los cuales son parte de las etapas que más inciden en el costo final del producto. En el mundo, la tendencia a reemplazar los combustibles fósiles por aquello de origen renovable como el etanol, genera una demanda del mismo y la necesidad de optimizar los procesos de fermentación, destilación y deshidratación (Uyazán, A. Gil, I., Agilar J., Rodríguez G., Caicedo, L., 2006).

La experiencia en el campo de los biocombustibles, etanol en nuestro caso, nos motivó el interés personal por los “cuellos de botella” que merman la producción a fin de estudiar las mejoras para optimizar la eficiencia del proceso.

1.1. ANTECEDENTES.

1.1.1 ANTECEDENTES HISTÓRICOS DE LOS BIOCOMBUSTIBLES EN EL MUNDO.

La utilización de los biocombustibles líquidos es tan antigua como la de los mismos combustibles de origen fósil y de los motores de combustión. Así, cuando ahora hace más de 100 años Rudolf Diesel diseñó el prototipo del motor diesel ya estaba previsto que funcionara con aceites vegetales. De hecho, en las primeras pruebas, lo hizo funcionar con aceite de cacahuete. Sin embargo, cuando el petróleo irrumpió en el mercado, era barato, razonablemente eficiente y fácilmente disponible. Uno de sus derivados, el gasóleo, rápidamente se convirtió en el combustible más utilizado en el motor diesel.

También cuando Henry Ford hizo el primer diseño de su automóvil Modelo T en 1908, esperaba utilizar el etanol como combustible. De hecho, de 1920 a 1924, la Standard Oil Company comercializó un 25 % de etanol en la gasolina vendida en el área de Baltimore, sin embargo; los elevados precios del maíz, junto con las dificultades de almacenamiento y transporte, hicieron abandonar el proyecto. A finales de la década de los veinte y durante la década de los treinta, se hicieron esfuerzos para recuperar sin éxito esta iniciativa. A raíz de esta decaída en la utilización del etanol, Henry Ford y diversos expertos unieron fuerzas para promover su recuperación. Se construyó una planta de fermentación en Atchinson (Kansas) con un potencial para fabricar 38.000 litros

Durante los años treinta, más de 2.000 estaciones de servicio en el mediano oeste vendieron este etanol hecho de maíz que denominó “Gasol”. No obstante eso, la competencia de los bajos precios del petróleo obligó al cierre de la planta de producción de etanol, a mediados de los años cuarenta. Como consecuencia, se acabó el negocio de los granjeros americanos y el Gasol fue sustituido definitivamente por el petróleo.

Durante el transcurso de la historia los biocarburantes siempre han tenido la crisis de los recursos petrolíferos como motor de desarrollo. Para comentar un caso significativo, a raíz de la destrucción del World Trade Center de New York el pasado 11 de septiembre de 2001 y los conflictos generados a partir de este hecho, existe la pugna por los recursos petroleros asiáticos. El terrorismo global y la opresión de los ricos sobre los pobres están relacionados con la concentración territorial de los combustibles fósiles y la dependencia que de estos tenemos. Una parte de los denominados biocombustibles se puede considerar como una forma de energía renovable, potenciando la producción de biocombustibles se contribuye a redistribuir la riqueza y a minimizar la dependencia de los combustibles fósiles, beneficiando al medio ambiente.

El agotamiento de los recursos fósiles, el incremento de las emisiones de contaminantes (que se sitúan por encima de la capacidad de regeneración de los ecosistemas) y el hecho de que dos terceras partes de las reservas petrolíferas están en la inestable región del Golfo Pérsico, claman a gritos la necesidad de encontrar alternativas energéticas. Las crisis energéticas que sacudieron el siglo XX fueron el motor para incentivar la búsqueda de nuevas fuentes energéticas. Sin embargo, el actual modelo energético mayoritariamente basado en las energías fósiles y que sustenta a la economía mundial, está en crisis. Precisamente los denominados biocombustibles han entrado justo cuando se acercaba o se daba un período de crisis.

1.1.2. ANTECEDENTES REFERENTES AL INICIO DE PRODUCCIÓN DE ETANOL EN EL PERÚ.

1.1.2.1. Caña Brava:

Con 6500 hectáreas, con una inversión de 65 millones de dólares y una capacidad instalada de 350,000 l/día, Caña Brava inicia sus operaciones el 15 de agosto del 2009 y el 12 de Diciembre del mismo año empiezan las exportaciones a Holanda.

1.1.2.2. Maple Etanol:

La empresa Maple Etanol inicia sus operaciones el 14 de Julio del 2012. Con 10,000 hectáreas, una inversión de 275 millones de dólares y una capacidad instalada de 400,000 L/día de alcohol anhidro, cuya actividad económica es la producción de alcohol anhidro y cogeneración de energía eléctrica a partir de la caña de azúcar y como principal subproducto vinaza que contiene 0.12% v/v, de etanol.

1.2. MATERIAS PRIMAS

Hoy en día se utilizan tres tipos de materias primas para la producción a gran escala de etanol de origen biológico (Naranjo, H., 1993).

Sustancias con Alto Contenido de Sacarosa

- Caña de azúcar.
- Remolacha.
- Melazas.
- Sorgo dulce.

Sustancias con Alto Contenido de Almidón

- Maíz.
- Patata.
- Yuca.

Sustancias con Alto Contenido de Celulosa

- Madera.
- Residuos agrícolas.

1.3. TECNOLOGÍAS PARA LA OBTENCIÓN DE ETANOL

El producto final de la destilación simple, a una atmósfera, del fermentado obtenido a partir de azúcar, es una mezcla azeotrópica de etanol y agua con una pureza límite del 88 % molar o 95 % en peso. Concentraciones mayores de etanol pueden obtenerse mediante las técnicas descritas a continuación:

1.3.1. Procesos que modifican la volatilidad etanol – agua

Mediante adición de un solvente selectivo el cual presenta fuerte afinidad por uno de los componentes clave, se modifican las volatilidades relativas de los componentes de la mezcla sin la formación de un nuevo azeótropo (Cerpa, 2005 y Uyazán, et al, 2002). Este fundamento se aplica a la destilación extractiva con solvente, para separar el agua del etanol. Se utilizan como solventes el benceno, pentano, dietil éter y últimamente el etilenglicol (Cerpa, 2005, Wolf, 1995) alcanzándose concentraciones etanol del 99.5% molar. Estos procesos requieren de etapas adicionales para recuperar el solvente y reciclarlo al sistema.

1.3.2. Procesos que utilizan el principio de la solvatación

Al agregar sal a una solución, las moléculas del soluto se dispersan y son rodeados por las moléculas de sal. Este fundamento es aplicado en la destilación extractiva con efecto salino, donde el agua es retenida en las sales y el alcohol es rechazado. Las sales más utilizadas son el Cloruro de calcio, cloruro de sodio, cloruro de potasio, ioduro de potasio y acetato de potasio (Cerpa, 2005). La concentración que alcanza el etanol en este proceso es de 99.7% (Pinto, 2000). Sin embargo, es

necesario de etapas posteriores para la recuperación de las sales por deshidratación con temperaturas superiores a los 100°C, de forma que pueda ser reciclado al proceso por lo tanto la necesidad de una energía adicional es significativa (Vásquez, et al, 2007).

1.3.3. Procesos que combinan la modificación de volatilidad y la solvatación

En este caso, se unen los principios de modificar las volatilidades de los componentes al adicionar un solvente y la utilización de sales para la solvatación, se conoce como destilación extractiva con solvente y sales, en donde la disolución de la sal, la reutilización y el transporte son mejorados por el solvente (Lei, et al, 2002). La cantidad de agente de separación necesario se reduce en un 500%, lo cual disminuye los requerimientos energéticos de manera sustancial (Vásquez, et al, 2007).

1.3.4. Procesos que modifican el equilibrio de fases a presión reducida

El enlace tipo puente de hidrógeno entre etanol y agua, es debilitado al someter la solución a presiones inferiores a la atmosférica, incrementando la diferencia de los puntos de ebullición y facilitando la separación de estos componentes, en consecuencia desaparece el azeótropo por debajo de los 6kPa (Sanchez y Cardona, 2005). Se conoce como destilación a presión reducida y para obtener un producto de alta pureza es necesario utilizar torres con gran número de etapas y con altas relaciones de reflujo. Los costos de energía son elevados debido al vacío requerido y al mantenimiento de las columnas de destilación que tienen elevadas cantidades de platos (Montoya, et al, 2005).

1.3.5. Procesos basados en el diámetro cinético de las moléculas

La diferencia de diámetros cinéticos de la molécula del agua 0.28nm y etanol

Son algunos aspectos importantes para recordar de la destilación:

- La destilación es un PROCESO DE SEPARACION TIPO COLUMNA. Sin tener en cuenta que sustancias se están separando, los principios básicos de diseño para la destilación siempre son similares.
- La asunción de que las etapas en una columna de destilación están en equilibrio, permite cálculos de concentraciones y temperaturas sin conocimiento detallado de modelos de flujo y calor, y velocidades de transferencia de masa. Esta asunción permite una simplificación mayor.
- Un rehervidor ("reboiler") tipo calderín y un condensador parcial son cada uno una etapa de equilibrio.
- En general, si no están involucrados ningún azeótropo o corrientes laterales, se pueden separar "n" productos con "n-1" columnas.
- Es necesario que las composiciones del vapor y composiciones de líquido sean diferentes a las condiciones de equilibrio que uno planea usar (es decir ningún azeótropo), por otra parte ninguna separación ocurrirá más allá de la condición azeotrópica.
- La destilación, es diferente de la evaporación porque ambos componentes en destilación son apreciablemente volátiles. En evaporación, normalmente sólo un componente se vaporiza.
- Los productos necesitan ser térmicamente estables encima del rango de temperatura de operación.
- Ningún componente corrosivo debe estar presente.
- Ningún componente que reaccione exotérmicamente (es decir genere calor) debe estar presente. Estas reacciones pueden "desbocarse" ("runaway") y formar condiciones explosivas.

- La destilación es diferente de la absorción porque en la absorción se aprovecha las diferencias de solubilidad (absorción física) o las reacciones específicas (absorción química).

Los principales tipos de destilación son:

- Destilación continua (por fraccionamiento)
- Destilación extractiva
- Destilación azeotrópica
- Destilación por lotes (“batch”)
- Destilación de equilibrio (“flash”)
- Destilación dinámica. (Moncada 2002).

1.4. DESCRIPCION DEL PROCESO

1.4.1. PREPARACIÓN DE LA MATERIA PRIMA

El objetivo principal de este tratamiento, radica en su acondicionamiento para la molienda, y consiste en trozar la caña de azúcar en porciones cada vez más pequeñas para así facilitar la extracción del jugo, para lo cual se hace necesario que la caña sea sometida a la acción de equipos de corte y desfibrado tales como la picadoras y el desfibrador, en las primeras se obtiene una reducción de tamaño de hasta 10 cm y en el segundo se desfibra para dejar expuestas las células para optimizar la extracción de jugo.

1.4.2. EXTRACCIÓN DEL JUGO

A nivel industrial, usualmente se utilizan dos formas de extracción; por trapiches y por difusor, siendo más utilizada en los últimos años la extracción por difusión, en virtud a su mejor eficiencia, fácil mantenimiento y operación frente a los trapiches.

1.4.3. EVAPORACIÓN DEL JUGO

La evaporación tiene por finalidad concentrar el jugo, para esto se hace uso de evaporadores, donde se elimina el agua del mosto en forma de vapor el cual posteriormente es utilizado como medio de calentamiento en el difusor.

1.4.4. FERMENTACIÓN

Consiste en la conversión de azúcares del mosto, principalmente en etanol, productos secundarios (ácidos orgánicos, alcoholes superiores, etc) dióxido de carbono y energía, haciendo uso de la levadura (*saccharomyces cerevisiae*).

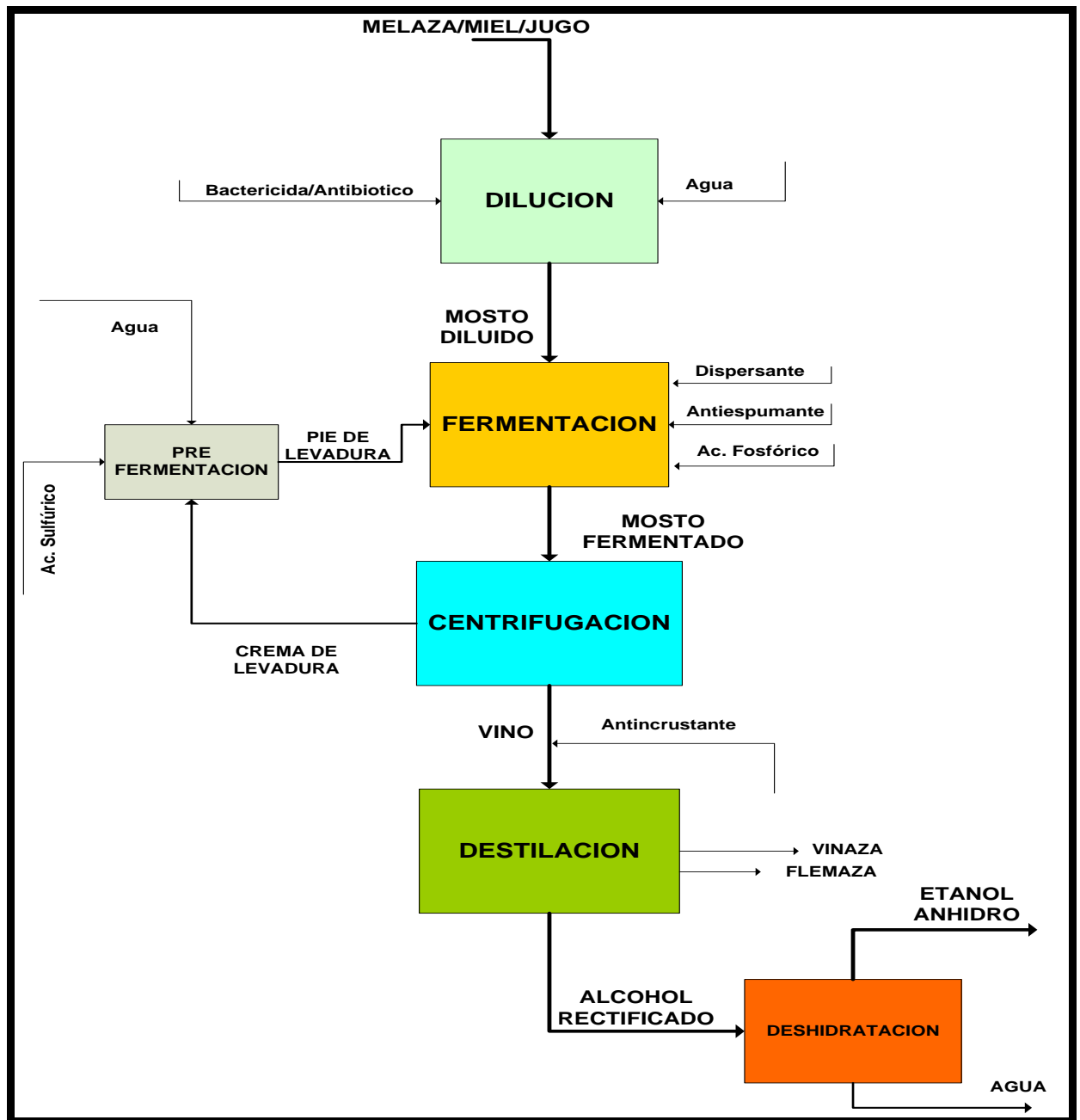
1.4.5. DESTILACIÓN

Comprende la obtención del alcohol hidratado a partir del vino obtenido como producto de la fermentación, para dicha operación es necesario hacer pasar el vino por un conjunto de columnas de destilación en donde gradualmente va incrementando su grado alcohólico hasta llegar a 95° Gl, en esta etapa además de obtenerse el alcohol rectificado se obtienen subproductos como el aceite fusell, la vinaza y las flegmasas.

1.4.6. DESHIDRATACIÓN

Es la última etapa del proceso y corresponde a la purificación del producto, para esto se hace necesario de una tecnología que permita deshidratar el etanol hidratado, esto es para incrementar su graduación alcohólica por encima de 99.9°Gl. (figuras 1 y 2).

Fig.1. Diagrama de bloques para la obtención de etanol anhidro.



Fuente: Maple Etanol.

1.5. ETANOL

1.5.1. DEFINICIÓN

Tipo de alcohol etílico que se caracteriza por tener como máximo 0.5 % de humedad y por ser compatible con las gasolinas con las cuales se puede mezclar para producir un combustible oxigenado para uso motor (Artículo N° 4, Ley 28054 “Promoción del Mercado de Biocombustibles”).

1.5.2. VENTAJAS DEL ETANOL

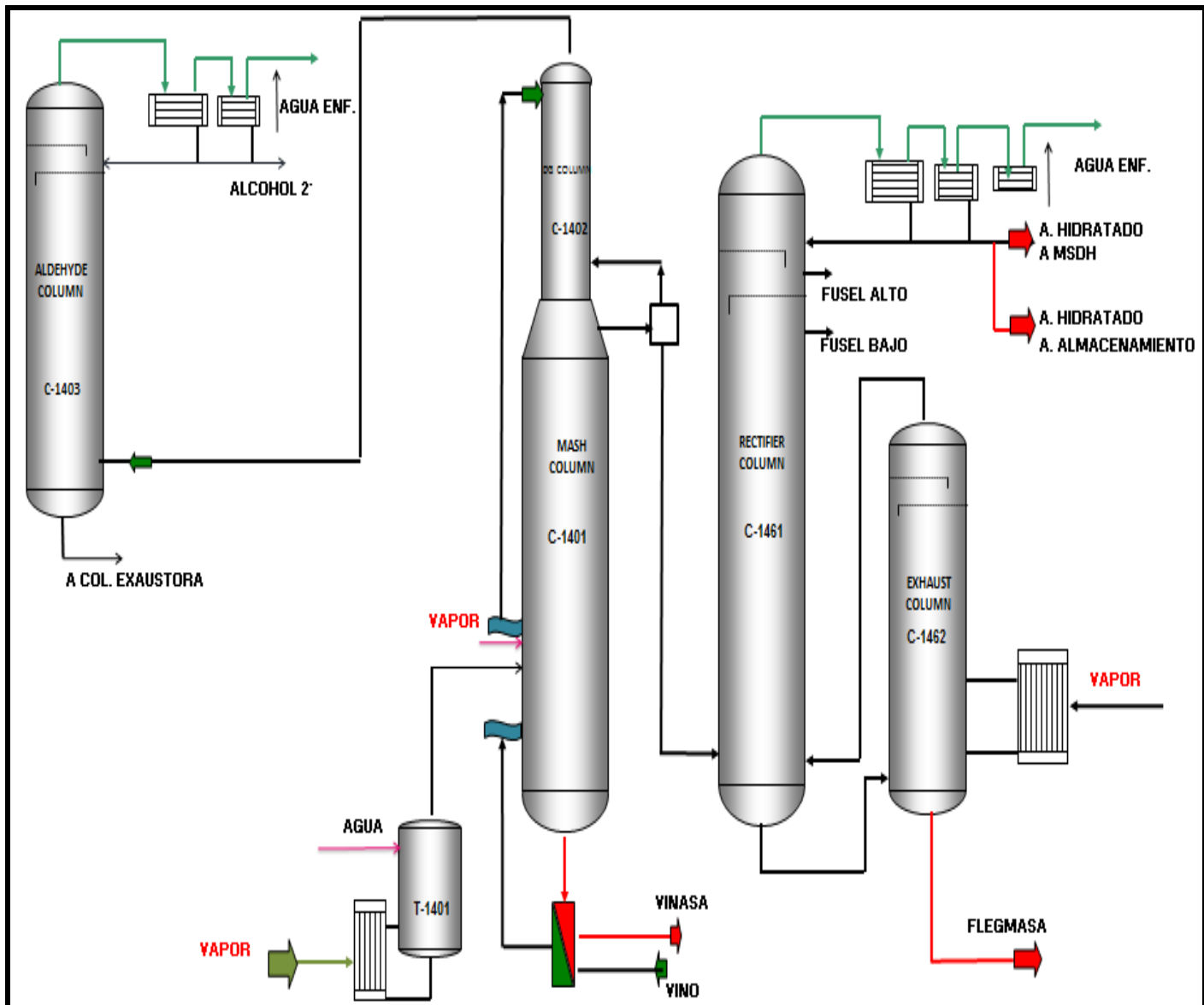
- Permiten la continuidad de la actividad del sector agrícola, evitando el abandono de superficies productivas.
- Mantiene la actividad de los sectores industriales relacionados directamente con la producción agrícola, tales como la industria de fertilizantes, maquinaria agrícola, semillas y diversos servicios que necesita la agricultura.
- Reducen las emisiones de compuestos tóxicos tales como el plomo o los derivados del azufre, presentes en las gasolinas.
- Sustituyen una parte importante de los combustibles importados de otros países, ahorrando así divisas e incrementando el PBI (De Juana, 2007).
- No incrementan los niveles de CO₂ en la atmósfera, con lo que se reduce el peligro del efecto invernadero, ayudando a preservar el medio ambiente.
- Proporcionan una fuente de energía reciclable y por lo tanto, inagotable.
- Se podrían reducir los excedentes agrícolas que se han registrado en las últimas décadas, mejorando la economía de los productores.
- Se mejora el aprovechamiento de tierras con poco valor agrícola y que, en ocasiones, se abandonan por la escasa rentabilidad de los cultivos tradicionales

1.5.3. DESVENTAJAS DEL ETANOL

- El costo de producción del etanol casi dobla al de la gasolina o gasóleo (sin aplicar impuestos). Por ello, no son competitivos sin ayudas públicas

- Se necesitan grandes espacios de cultivo, dado que el rendimiento en relación al área de cultivo es pequeño.
- Potenciación de monocultivos intensivos, con el consiguiente uso de pesticidas y herbicidas.

Fig. 2. Diagrama de equipos de la destilería Maple Etanol.



Fuente: Maple Etanol.

1.6. EQUILIBRIO DE FASES

La termodinámica del sistema a modelar es clave en la etapa de diseño conceptual puesto que es allí es donde se definen las principales operaciones y se determinan los parámetros de la destilación (Gil I. et al 2006).

La información experimental permite valorar y seleccionar el método de propiedades termodinámicas, que posteriormente se utilizará para efectos de diseño y operación.

Cuando no se dispone de información experimental, antes de continuar con el diseño conceptual, es recomendable realizar el trabajo necesario para obtener dicha información que acompañada de una metodología adecuada permitirá la selección de los modelos de propiedades termodinámicas (Carlson, 1996).

El término *equilibrio de fases* implica una condición de equilibrio entre dos o más fases, cada una de las cuales constituye un todo homogéneo sin tendencia a cambiar sus propiedades con el tiempo. Existen dos aspectos muy concretos que se deben destacar; primero, resulta evidente que la *temperatura* de las fases debe ser la misma, de lo contrario existiría un flujo irreversible de energía calorífica entre ellas y segundo, también debe haber una igualdad de *presiones* ya que, caso contrario, la inestabilidad ocasionaría una compresión de una de las fases y la expansión de la otra con un intercambio irreversible de energía. Sin embargo, estas dos condiciones no son suficientes para asegurar el equilibrio de fases.

En *Termodinámica*, las posibles transformaciones que pueden tener lugar en un sistema se expresan mediante las funciones conocidas como potenciales termodinámicos.

En el comentario anterior sólo se establecieron las condiciones cualitativas para el equilibrio de fases, pero la descripción cuantitativa implica la evaluación de ciertas propiedades y la relación existentes entre ellas. Destacamos el empleo de la función de Gibbs (G), la energía interna (U), la entalpía (H), y la función de Helmholtz (A), como funciones de trabajo. Como

condiciones adicionales para el equilibrio se impone la minimización de las funciones potenciales mencionadas, llegando a anularse al alcanzar dicho estado. Entre las magnitudes citadas anteriormente, la función de Gibbs tiene una atención especial para el tratamiento matemático del equilibrio entre fases. Por ello, en un sistema multifásico la situación cercana o de equilibrio puede expresarse matemáticamente como:

$$dG = (-SdT + Vdp) \leq 0 \quad (\text{I})$$

Ecuación que se satisface para cambios de estado de cualquier sistema cerrado a p y T constantes. La igualdad/desigualdad se aplica a un cambio del sistema entre estados de equilibrio/desequilibrio en los procesos reversibles/irreversibles, señalando la dirección del cambio que conduce al equilibrio. Así, todos los procesos irreversibles que transcurren a T y p constantes, evolucionan en la dirección que causa una disminución de la función de Gibbs.

1.6.1 POTENCIAL QUÍMICO. ECUACIÓN DE GIBBS-DUHEM

Las propiedades macroscópicas de los fluidos homogéneos que están en equilibrio son funciones de la temperatura, de la presión y de la composición. Para el caso de la función Gibbs se tiene:

$$G = G(p, T, n_1, n_2, \dots) \quad (\text{II})$$

Siendo n_i los números de moles presentes de las sustancias i . En vista de la dependencia indicada, cualquier cambio infinitesimal de G puede expresarse a través de los cambios infinitesimales que experimentan las variables de las que depende. Así, de acuerdo con las propiedades de una función continua:

$$dG = \left(\frac{\partial G}{\partial p} \right)_{T, n_i} dp + \left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_{p, n_i} dT + \sum_i \left(\frac{\partial G}{\partial n_i} \right)_{p, T, n_{j \neq i}} dn_i \quad (\text{III})$$

A partir de las correspondientes relaciones de Maxwell, las dos primeras derivadas parciales pueden ser sustituidas, dando lugar a otra expresión análoga para la función de Gibbs. Por otro lado, la derivada parcial del último sumando indica la variación experimentada por la

función de Gibbs de la solución con el número de moles de uno de sus componentes se conoce con el nombre de *potencial químico*, μ_i .

Teniendo en cuenta las ecuaciones anteriores y la relación existente entre cada magnitud extensiva e intensiva, la ecuación (III) puede ponerse ahora como:

$$d(nG) = -(nS)dT + (nV)dp + \sum_i \mu_i dn_i \quad (\text{IV})$$

Pero por otro lado como:

$$G = \sum x_i \bar{g}_i, \text{ y } d(nG) = \sum \bar{g}_i dn_i + \sum n_i d\bar{g}_i \quad (\text{V})$$

Se tiene:

$$-(nS)dT + (nV)dp - \sum n_i d\mu_i = 0, \quad (\text{VI})$$

Y al dividir por n se tiene:

$$-s dT + v dp - \sum x_i d\mu_i = 0 \quad (\text{VII})$$

Estas ecuaciones son una forma general de la *ecuación de Gibbs-Duhem*, aplicada en este caso a la función de Gibbs, pero que puede ser utilizada para cualquier propiedad termodinámica. Dicha ecuación es una de las más importantes relaciones de la termodinámica de soluciones, si bien, su forma más usual es presentarla en condiciones de presión y temperatura constantes en las que resulta muy simplificada:

$$\sum x_i d\mu_i = 0 \quad (\text{VIII})$$

O también,

$$\sum x_i d\bar{g}_i = 0 \quad (\text{IX})$$

O sea que; en esas condiciones, las únicas variaciones en el potencial químico o en la propiedad molar parcial son las debidas a los cambios de composición (Blanco, A., 1997).

1.6.2. OTRAS MAGNITUDES DE USO EN EL EQUILIBRIO ENTRE FASES

Las ecuaciones establecidas anteriormente, son suficientes para sentar las bases termodinámicas del tratamiento de sistemas en equilibrio. Sin embargo, el potencial químico no es una propiedad práctica bajo el punto de vista matemático y por otro lado, en los estudios de fluidos resulta de gran utilidad comparar las propiedades de un sistema real con las de otro ideal. Por ello, es conveniente introducir nuevas magnitudes auxiliares, tales como la *fugacidad*, la *actividad* y sus respectivos coeficientes que serán la conexión entre el mundo abstracto de las matemáticas y de la termodinámica con el de la realidad física.

1.6.3. FUGACIDAD

Es una propiedad termodinámica (f). Se define en términos del potencial químico (μ):

$$\mu = \mu^0 + RT * \ln(f) \quad (1)$$

μ^0 es una función solo de la temperatura; y es el potencial químico de una sustancia cuando su estado es tal que la fugacidad es uno. A temperatura constante:

$$d\mu = [RT * d(\ln(f))]_T \quad (2)$$

Para gases se cumple por definición:

$$\lim_{P \rightarrow 0} \frac{f}{P} = 1 \quad (3)$$

Con cualquiera de las dos definiciones anteriores (1) y (2), y la condición de límite (3), la fugacidad queda definida.

1.6.4. PARA UN GAS IDEAL

$$d\mu = V dP = \frac{RT}{P} dP = RT d(\ln(P)) \quad (4)$$

Integrando:

$$\mu = \mu^0 + RT \ln(P) \quad (5)$$

μ_0 es una constante de integración, dependiendo solo de la temperatura. La similitud entre (1) y (5) hace que se considere a la fugacidad como una presión “efectiva” o real.

Cuando la presión tiende a cero (según (3)), la fugacidad y la presión se igualan, *en el comportamiento del gas ideal*. La fugacidad tiene *unidades de presión*.

1.6.5. PARA UNA SUSTANCIA EN SOLUCIÓN:

Similarmente a la Ec. (1), definimos ahora:

$$\hat{\mu}_i = \mu^0_i + RT \ln(\hat{f}_i) \quad (6)$$

$$d\hat{\mu}_i = \left[RT \, d(\ln(\hat{f}_i)) \right]_T \quad (7)$$

Donde, el supraíndice indica componente en una solución, y el subíndice (i) indica el componente.

Para gases, si *la mezcla es perfecta (gas perfecto)*, o sea, se comporta como un gas ideal, entonces la fugacidad de un componente se aproxima a su presión parcial y, se cumple:

$$\lim_{P \rightarrow 0} \frac{\hat{f}_i}{p_i} = 1 \quad (8)$$

La presión parcial se define como ya sabemos:

$$p_i = y_i P \quad (9)$$

1.6.6. CONDICIÓN EN EL EQUILIBRIO:

Si tomamos dos fases: líquido-vapor (L - V), se debe cumplir en el equilibrio según sabemos:

$$\begin{aligned} T^L &= T^V \\ P^L &= P^V \\ \mu^L &= \mu^V \end{aligned}$$

Integrando (7) para ambas fases, y considerando la igualdad anterior, podemos escribir:

$$\hat{\mu}_i^V - \hat{\mu}_i^L = 0 = RT \ln \frac{\hat{f}_i^V}{\hat{f}_i^L};$$

Lo que requiere igualdad de fugacidades en ambas fases:

$$\hat{f}_i^L = \hat{f}_i^V \quad (10)$$

1.6.7. DETERMINACIÓN DE FUGACIDADES EN GASES PUROS:

De (2) y de (4) podemos escribir:

$$RT d \ln(f) = V dP$$

Sumando $-RT d \ln(P)$ a ambos lados y reordenando:

$$RT d \ln\left(\frac{f}{P}\right) = \left(v - \frac{RT}{P}\right) dP$$

Si integramos entre $P = 0$ ($f/P = 1$, según (3)), y P , tenemos:

$$RT \ln\left(\frac{f}{P}\right) = \int_0^P \left(v - \frac{RT}{P}\right) dP \quad (11)$$

Esta ecuación se puede usar para determinar f :

1. Utilizando integración gráfica o numérica de datos experimentales $V = f(P)$ a T constante.
2. Utilizando una ecuación de estado para estimar dicha funcionalidad (Virial, PR, SR, SRK, etc.), como veremos más adelante.
3. Como se expresará en el punto siguiente, utilizando datos de propiedades reducidas.

1.6.8. COEFICIENTE DE FUGACIDAD:

A la relación f/P se la llama Coeficiente de Fugacidad, por conveniencia, ya que aparece sistemáticamente en esa forma en muchas de las expresiones que ya derivamos o derivaremos:

$$\phi = \frac{f}{P} \quad (12)$$

Utilizando esta definición y la expresión $V = \Delta z RT/P$, de (11) tenemos:

$$\ln(\phi) = \int_0^P (z - 1) \frac{dP}{P} \quad (13)$$

Donde z puede estimarse en función de las relaciones de estados correspondientes.

También en función de variables reducidas. Esto se logra operando algebraicamente sobre la ecuación anterior, para dar:

$$\ln(\phi) = \int_0^{Pr} (z - 1) \frac{dPr}{Pr} \quad (14)$$

Con lo cual ϕ también es una propiedad que puede calcularse en el estado “reducido” (como función de propiedades en dicho estado).

Existen en la bibliografía numerosas gráficas y/o correlaciones que surgen de (13) y (14).

1.6.9. DETERMINACIÓN DE LA FUGACIDAD EN MEZCLAS GASEOSAS:

Para un componente en una mezcla gaseosa se define al coeficiente de fugacidad:

$$\phi_i = \frac{\hat{f}_i}{P_i} = \frac{\hat{f}_i}{y_i P} \quad (15)$$

Partiendo de la Ec. (7) y de la siguiente relación entre potencial químico (a T , P y n_i constantes) en una mezcla:

$$d\hat{\mu}_i = \left(\frac{\partial v}{\partial n_i} \right)_{T,P,n_j} dP \quad (16)$$

e igualando (16) con (7).

Substrayendo $RT \, d\ln(P_i)$ de ambos lados y operando algebraicamente, se tiene:

$$RT \, d \left(\ln \frac{\hat{f}_i}{P_i} \right) = \left[\left(\frac{\partial v}{\partial n_i} \right)_{T,P,n_j} - \frac{RT}{P} \right] dP \quad (17)$$

Integrando y teniendo en cuenta las Ecs. (8) y (15):

$$RT \ln \hat{\phi}_i = \int_0^P \left[\left(\frac{\partial v}{\partial n_i} \right)_{T,P,n_j} - \frac{RT}{P} \right] dP \quad (18)$$

En este caso, es difícil obtener datos experimentales para integrar directamente la Ec. (17). Por lo tanto, como veremos luego, se recurre a la utilización de ecuaciones de estado que con el empleo de adecuadas reglas de mezclado representan las propiedades de la mezcla apropiadamente. Las ecuaciones correspondientes que surgen de reemplazar las relaciones indicadas se verán más adelante, al tratar dichas ecuaciones de estado.

Por otro lado, podemos recurrir a modelos de comportamiento de la mezcla. Por ejemplo, ya habíamos comentado que en una mezcla de gases perfecta, se cumple:

$$\hat{f}_i = p_i = y_i P$$

Ahora, podemos definir el modelo de *solución ideal* de gases, de esta manera:

$$\hat{f}_i = f_i^0 y_i$$

En donde decimos que la fugacidad del componente (i) en una mezcla gaseosa (solución ideal) se puede calcular como el producto de la fugacidad de ese componente puro a la presión y temperatura de la solución, multiplicada por su fracción molar.

Este modelo *es aceptable* cuando:

- La presión es baja; o a presiones moderadamente altas (y además $y_i \rightarrow 1$).

No es buena aproximación cuando:

- Las composiciones son del mismo orden (ninguno tiende a uno, $y_i \rightarrow 1$), y las propiedades de las moléculas de los componentes son bastante diferentes entre sí. Solo se puede utilizar a moderadas presiones si las propiedades de los integrantes de la mezcla son muy similares entre sí.

1.6.10. DETERMINACIÓN DE LA FUGACIDAD EN LÍQUIDOS PUROS:

Se sabe que en equilibrio:

$$f^L = f^G$$

La presión en equilibrio se denomina presión de vapor o saturación. De la expresión (que se deriva de (2) y de (4)):

$$RT d \ln(f) = v dP$$

Integrando entre una presión P y la de saturación tenemos:

$$RT * \ln \frac{f^L}{f^{Sat}} = v(P - P^{Sat}) \quad (20)$$

Asumiendo que la variación del volumen con la presión es despreciable (incompresible) en el líquido. f^L es la fugacidad del líquido a una T dada y a la presión P , y el

superíndice indica valores a las condiciones de saturación. f^{Sat} es la fugacidad del gas (o líquido) a esa condición y v es el volumen molar líquido.

1.6.11. FUGACIDAD EN SOLUCIONES LÍQUIDAS:

Solución ideal: Al igual que en las mezclas gaseosas, podemos escribir para una solución líquida ideal, por definición:

$$\hat{f}_i^L = f_i^{0L} x_i$$

Donde \hat{f}_i^L es la fugacidad del componente (i) en la mezcla, y f_i^{0L} es la fugacidad de (i) como líquido puro, a la temperatura y presión de la mezcla. Lamentablemente, este modelo es satisfactorio en muy pocas soluciones. Solo en los casos en que los componentes son muy similares (isómeros, miembros de una misma familia, etc.).

Además, cuando no se cumple, *las desviaciones pueden ser muy significativas*. Eso sucede cuando las propiedades de las moléculas de los constituyentes de la solución son muy diferentes entre sí (tamaño, polaridad, etc.)

1.6.12. ALGUNAS DEFINICIONES IMPORTANTES:

De la misma forma que en la Ec. (15) podemos definir ahora el coeficiente de fugacidad de un componente (i) en la mezcla líquida:

$$\phi_i^L = \frac{\hat{f}_i^L}{f^{Sat}} \quad (21)$$

Por otro lado, para corregir las desviaciones del comportamiento de las soluciones líquidas ideales respecto del real, se definen los *coeficientes de actividad*. En la Ec. (20) agregamos por definición:

$$\hat{f}_i^L = f_i^{0L} x_i \gamma_{iL} \quad (22)$$

Donde:

$$\frac{\hat{f}_i^L}{f_i^{0L} x_i}, \text{ es el coeficiente de actividad.}$$

Esto es similar a la corrección que se realiza en el modelo de gas ideal cuando se introduce el factor de compresibilidad z .

Una gran diferencia es que mientras z solo depende de T y P , aquí γ_{iL} también depende fuertemente, de la composición del líquido.

Por otra parte, al cociente entre la fugacidad de una sustancia en solución y su fugacidad en un estado de referencia (puro, por ejemplo) se lo suele denominar **actividad**:

$$a_i = \frac{\hat{f}_i}{f_i^0} \quad (23)$$

Para una solución líquida:

$$a_i^L = \frac{\hat{f}_i^L}{f_i^{0L}} \quad (24)$$

Luego, de (22) y (24) se desprende:

$$\gamma_i^L = \frac{a_i^L}{x_i} \quad \text{o} \quad a_i^L = \gamma_i^L x_i \quad (25)$$

De donde se sigue que en una solución líquida cada componente se manifiesta a través de su actividad, y **no** por su “composición”, siendo el coeficiente de actividad el “factor de corrección”.

Por último, y por “simetría”, podemos razonar igual para la fase gas, y definir un coeficiente de actividad para dicha fase:

$$a_i^V = \gamma_i^V y_i \quad (26)$$

1.6.13. RELACIONES DE EQUILIBRIO EN MEZCLAS L-V:

Constantes de Equilibrio: Para cada componente en equilibrio, se define una “*constante*” de equilibrio de la siguiente manera:

$$y_i = K_i x_i \quad (27)$$

1.6.14. MEZCLA LÍQUIDA Y VAPOR IDEALES:

Aplicando la igualdad de fugacidades en ambas fases como condición de equilibrio (Ec. (10)), y además, la condición de idealidad de ambas soluciones (Ecs. (18) y (20)) tenemos:

$$\hat{f}_i^G = \hat{f}_i^L$$

Además:

$$\hat{f}_i^G = f_i^{0G} y_i, \quad \hat{f}_i^L = f_i^{0L} x_i$$

Luego:

$$f_i^{0G} y_i = f_i^{0L} x_i$$

De la Ec. (27) entonces:

$$K_i = \frac{f_i^{0L}}{f_i^{0G}} \quad (28)$$

En condiciones ideales, $f_i^{0G} \rightarrow P$ (presión del sistema). Además, de la Ec. (19) vemos que si ambas P y P_{Sat} son bajas, la fugacidad del líquido tiende a la presión de saturación p_{Sat} , ya que f_{Sat} tiende a ese valor en esas condiciones. Luego, tenemos:

$$K_i = \frac{p_i^s}{P} \quad (29)$$

En la Ec. (29), K_i depende solo de P y T , a través de $p_{i, sat}$. Esta expresión de K_i es la que corresponde a la *ley de Raoult*.

Esta condición (ambas fases ideales), es muy poco común. Por lo tanto, deben emplearse los factores de corrección previamente definidos (coeficientes de actividad y/o

de fugacidad) para contemplar desviaciones del comportamiento ideal tanto en la fase líquida como en la fase vapor, o en ambas simultáneamente (el caso más complicado).

De esta forma, en la bibliografía y en la literatura especializada, suelen encontrarse diversas formulaciones de las constantes de equilibrio, llamadas *simétricas* o *asimétricas*.

De las ecuaciones anteriores se puede escribir:

$$\begin{array}{l|l} \hat{f}_i^V = \phi_i^V y_i P & \hat{f}_i^V = \gamma_i^V y_i f_i^{0V} \\ \hat{f}_i^L = \phi_i^L x_i P & \hat{f}_i^L = \gamma_i^L x_i f_i^{0L} \end{array}$$

De aquí podemos derivar las llamadas expresiones simétricas:

$$K_i = \frac{\phi_i^L}{\phi_i^V} \quad (30)$$

$$K_i = \left(\frac{\gamma_i^L}{\gamma_i^V} \right) \left(\frac{f_i^{0L}}{f_i^{0V}} \right) \quad (31)$$

O las expresiones para la constante K_i asimétricas:

$$K_i = \frac{\phi_i^L P}{\gamma_i^V f_i^{0V}} \quad (32)$$

$$K_i = \frac{\gamma_i^L f_i^{0L}}{\phi_i^V P} \quad (33)$$

La situación en la cual la presión es superior a la atmosférica, invalida la hipótesis de gas ideal.

1.6.15. PRESIONES MODERADAS, SOLUCIONES IDEALES

En estas condiciones, podemos asumir

$$\gamma_i^L = \gamma_i^V = 1$$

Por lo que la Ec. (31) se iguala a la (28):

$$K_i = \frac{f_i^{0L}}{f_i^{0V}}$$

Pero ahora no es válida la Ec. (29) (Ley de Raoult). Aquí debe utilizarse la Ec. (19), y existen problemas para definir la fugacidad de cada componente en su estado puro como líquido, cuando a las condiciones de la mezcla el componente (i) no puede existir como líquido. Aquí se utilizan técnicas de extrapolación.

Utilizando la Ec. (19), y una ecuación de estado, puede obtenerse una ecuación para K_i . Por ejemplo, utilizando la Ec. R - K , se puede llegar a la siguiente expresión:

$$K_i = \left(\frac{P_i^{Sat}}{P_i} \right)^* \exp \left[\frac{0,4278}{T_{ri}^{2,5} P_{ci}} (P - P_i^{Sat}) + \frac{v_i^L (P - P_i^{Sat})}{RT} \right] \quad (34)$$

El exponente puede ser visto como una corrección a la ley de Raoult, y no puede despreciarse a presiones superiores a una atmósfera; o sea presiones moderadas.

Debe recordarse que asumimos *ambas fases* como *soluciones ideales*.

1.6.16. SOLUCIONES LÍQUIDAS NO IDEALES:

Aquí, como expresáramos anteriormente, debe contemplarse el factor de corrección (coeficiente de actividad) para la fase líquida (o bien de fugacidad).

a) Caso en el que no existen moléculas polares (líquido):

Según la Ec. (30), podemos calcular:

$$K_i = \frac{\phi_i^L}{\phi_i^V} \quad (35)$$

Como se expresó anteriormente, los coeficientes de fugacidad pueden ser calculados “*fácilmente*” mediante el empleo de adecuadas condiciones de estado para la fase gas, y apropiadas reglas de mezclado. Si bien las ecuaciones de Redlich-Kwong (RK), Peng-Robinson (P-R), Soave o Soave-Redlich-Kwong (S-R-K) resultan o pueden parecer complicadas, y especialmente tediosas de manipular para el cálculo en mezclas de muchos componentes, la utilización de algoritmos computacionales facilita enormemente el problema.

Solo debe disponerse de un programa y los datos de las constantes de cada componente, y los parámetros de interacción binaria para los constituyentes de la mezcla.

Además, cuando la ecuación de estado es adecuada tanto para describir la fase vapor como la líquida, se puede calcular simultáneamente el coeficiente de fugacidad en ambas fases, simplificando (o acelerando) el cálculo de la Ec. (35).

Debe remarcarse aquí que ϕ_i^V refleja simultáneamente dos efectos: gas no-ideal, y solución no-ideal. A bajas presiones, ambos efectos son despreciables.

A moderadas presiones, la solución puede *seguir siendo ideal*, pero *no* sigue la ley de los gases ideales.

No obstante, en el líquido, a moderadas presiones, es como se dijo; muy probable que no siga el comportamiento de solución ideal, dependiendo esto de la composición.

Aquí debemos enfatizar que la mayoría de las ecuaciones de estado que representan adecuadamente el comportamiento de la fase líquida, solo permiten aproximar $\hat{\phi}_i^L$ adecuadamente si en la mezcla *no existen moléculas polares*.

Se ha intentado, agregando un tercer parámetro de interacción binario, u otras funcionalidades, describir adecuadamente el comportamiento de la fase líquida aún con componentes moderadamente polares. Sin embargo, el cálculo es tedioso, y por ahora los beneficios no justifican su aplicación.

Esto nos lleva a utilizar otro enfoque cuando en la mezcla existen fuentes no idealidades en el líquido.

b) Mezclas con sustancias polares en el líquido:

A moderadas o bajas presiones, la Ec. (33) con $\hat{\phi}_i^V = 1$ se convierte en:

$$K_i = \frac{\gamma_i^L f_i^{0L}}{P} \quad (36)$$

Además, $f_i^{0L} \rightarrow P^{Sat}$

Por lo tanto, nuevamente tenemos una ecuación similar a la (29) (ley de Raoult) pero afectada por el coeficiente de actividad en el líquido:

$$K_i = \frac{\hat{\gamma}_i^L P_i^S}{P} \quad (37)$$

A presiones moderadas podemos aplicar la Ec. (36) directamente, o alguna simplificación para el cálculo de $\hat{\phi}_i^V$.

c) Mezclas polares a presiones moderadas o altas:

La Ec. (37) asume que la corrección por presión es despreciable (recordar Ec. (19)). Si el término de corrección por presión es importante, debe utilizarse la siguiente expresión:

$$K_i = \frac{\gamma_i^L P_i^S}{P} F_i \quad (38)$$

Donde F_i , el factor de corrección por presión (Factor de Poynting):

$$F_i = \left(\frac{\phi_i^S}{\phi_i} \right)^* \exp \left\{ \int_{P_i^S}^P \frac{v_i^L}{RT} dP \right\} \quad (39)$$

En general, aún a presiones moderadas o altas no existen significantes datos o correlaciones fácilmente aplicables que permiten calcular F , por lo que se considera unitario. Obviamente, debe tenerse en cuenta que se produce un error y puede ser importante en ciertos casos. (Perry, J., 1966; Smith, J., et al. 2003).

1.7. SIMULACIÓN

Según **R. E. Shannon**, la simulación es el proceso de diseñar un modelo de un sistema real y llevar a término experiencias con él, con la finalidad de comprender el comportamiento del sistema o evaluar nuevas estrategias dentro de los límites impuestos por un cierto criterio o un conjunto de ellos - para el funcionamiento del sistema.

1.8. DISEÑO DE PROCESOS QUÍMICOS

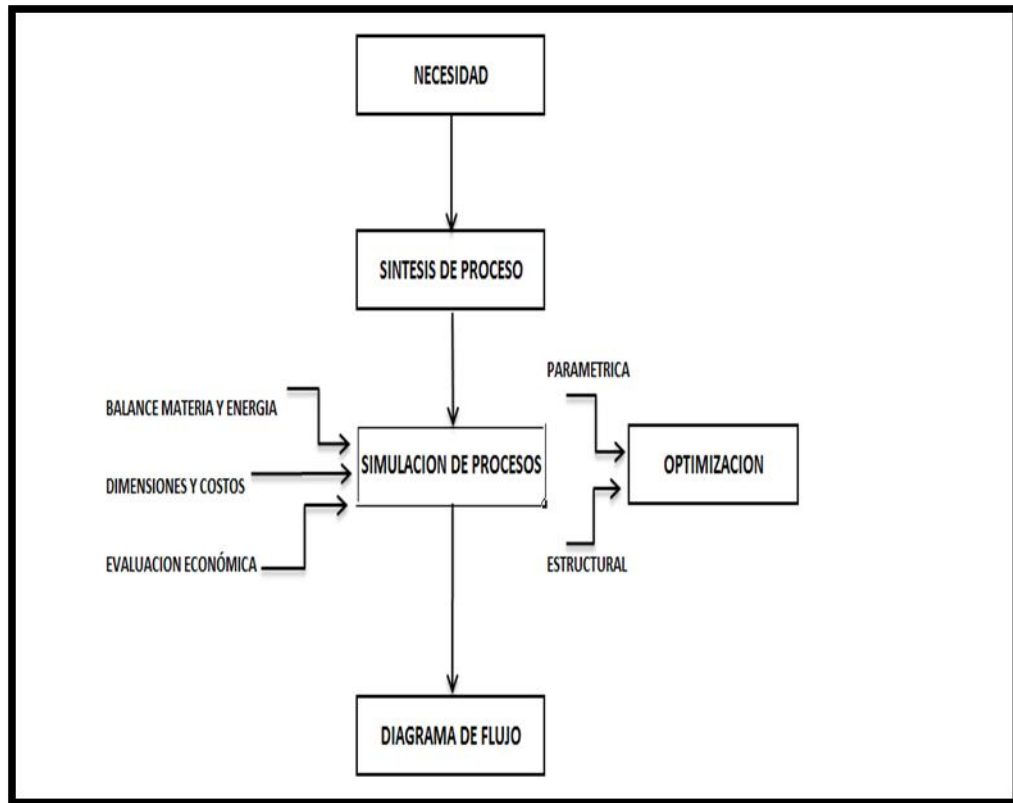
La *síntesis de procesos* es una de las tareas más complejas y exigentes confrontadas por el ingeniero químico. Desde un punto de vista pragmático, el uso de técnicas de síntesis de procesos se introdujo lentamente como consecuencia de las condiciones cambiantes en la producción industrial y el surgimiento de tremendos avances productivos y tecnológicos (Scenna, N., 1999).

El diseño de procesos puede considerarse constituido por tres etapas:

- ✓ **Síntesis del Proceso:** Es la etapa en la cual se crea la estructura básica del diagrama de flujo; esto es, se seleccionan los equipos a ser utilizados, con sus correspondientes interconexiones, y se establecen los valores iniciales de las condiciones de operación.
- ✓ **Simulación del Proceso:** Es la etapa en la cual se requiere solucionar balances de materia y energía para un proceso, calcular dimensiones y costos de los equipos y efectuar una evaluación económica preliminar del proceso.
- ✓ **Optimización de Procesos:** Consiste en encontrar los valores óptimos ya sea mínimos o máximos de una variable, según sea la necesidad, en ingeniería química, es común hablar de minimizar costos y maximizar producción. Puede ser paramétrica, modificando

parámetros tales como presión o temperatura. O estructural cuando se hacen modificaciones al diagrama reflujo involucrando a los equipos y/o sus interconexiones (Scenna, N., 1999).

Fig. 3. Esquema que muestra la secuencia llevada a cabo en el diseño de procesos.



Fuente:(Martínez, V., et al, 2000).

1.9. SIMULACIÓN DE PROCESOS QUÍMICOS.

La disciplina de la simulación de procesos químicos tuvo sus primeras manifestaciones en el ámbito universitario y poco a poco fue penetrando en la industria química. Esta simulación tuvo sus orígenes en el auge mismo de la investigación operacional, por ser novedosa herramienta para realizar confiable y velozmente diversos cálculos numéricos

La simulación de proceso puede ser definida como una técnica para evaluar en forma rápida un proceso con base en una representación del mismo, mediante modelos matemáticos. La solución de estos se lleva a cabo

por medio de programas de computadora y permite tener un mejor conocimiento del comportamiento de dicho proceso (Martínez, V., et al. 2000).

Las herramientas que se disponen actualmente para asistir al ingeniero en el desarrollo de un simulador son muy variadas.

LENGUAJES DE PROGRAMACION

FORTRAN.

PASCAL.

DELPHI.

LENGUAJES DE SIMULACION:

GPROMS.

ISIM.

UTILITARIOS MATEMATICOS:

MATLAB.

SIMULINK.

MATHCAD.

SIMULADORES DE PROCESOS QUIMICOS

ASPEN.

HYSYS.

CHEMCAD (Martínez, V., et al. 2000).

1.9.1. SELECCIÓN DEL PAQUETE TERMODINÁMICO:

La estimación precisa de propiedades físicas y termodinámicas es esencial en el análisis y la simulación de procesos. En el caso del equilibrio líquido-vapor o líquido-líquido la selección adecuada de los métodos de predicción de estas propiedades es crucial, ya que una mala elección puede conducir a errores muy grandes.

Para determinar la aplicabilidad de una metodología para un caso particular deben tenerse en cuenta factores tales como la naturaleza de los

compuestos químicos intervinientes, la naturaleza del proceso analizado, y la disponibilidad de datos experimentales.

Entre los modelos más empleados, las ecuaciones de estado pueden predecir el comportamiento en equilibrio de ambas fases (líquido y vapor) de mezclas de moléculas relativamente simples. Los modelos de coeficiente de actividad se usan generalmente para predecir el comportamiento de la fase líquida de mezclas de sustancias polares (Black, C. 1980).

Los modelos matemáticos son el elemento esencial en un simulador de procesos.

Los modelos de un proceso químico son todas las relaciones matemáticas derivadas de las leyes de conservación, las leyes de la termodinámica y las restricciones del control y diseño. Estos modelos matemáticos para cada equipo en el proceso, un sistema de ecuaciones algebraicas y diferenciales que describe ese equipo. Los modelos matemáticos de los equipos de un proceso, en conjunto dan forma al modelo matemático del proceso completo. Este debe ser resuelto por medio de algún algoritmo de solución (Martínez, V., et al. 2000).

En el caso de la simulación de procesos en estado estacionario se suele utilizar tres tipos de algoritmos:

- Método Modular secuencial.**
- Método orientado a ecuaciones.**
- Método modular simultaneo.**

Entre las aplicaciones más importantes de la simulación de procesos se tiene:

- ✓ Detección de cuellos de botella en la producción.
- ✓ Predicción de los efectos de cambio en las condiciones de operación y capacidad de la planta.

- ✓ Optimización de las variables de operación.
 - ✓ Análisis de nuevos proceso para nuevos productos.
 - ✓ Evaluación de alternativas para reducir el consumo de energía.
 - ✓ Análisis de condiciones críticas de operación.
 - ✓ Análisis de factibilidad y viabilidad de nuevos procesos.
 - ✓ Optimización del proceso para minimizar la producción de desechos y contaminantes.
 - ✓ Entrenamiento de operadores e ingenieros de proceso.
 - ✓ Evaluación de la factibilidad de automatización de un proceso.
- (Martínez, V., et al. 2000).

1.9.2. OPCIONES TERMODINÁMICAS

El diseño y la simulación de procesos químicos necesitan datos de propiedades físicas, termodinámicas y de transporte, y éstos se calculan a partir de modelos de propiedades con base teórica o empírica. La representación precisa de las propiedades es fundamental para la simulación de procesos. El usuario debe seleccionar un modelo para representar las propiedades, el uso de un modelo inadecuado puede cambiar radicalmente los resultados de la simulación y perder validez.

Cada modelo termodinámico ha sido desarrollado para ciertos intervalos específicos de condiciones y para ciertos tipos de sustancias, no puede reproducir el comportamiento de todos los compuestos y en todas las condiciones (Martínez, V., et al. 2000).

1.9.2.1. El Enfoque Uniforme

El enfoque uniforme consiste en usar la misma ecuación de estado para la predicción de las propiedades de las fases líquido y vapor en equilibrio. Cualquier ecuación de estado expresa las propiedades volumétricas presión-volumen-temperatura (P-V-T) de un compuesto puro o de una mezcla.

Siempre que sea posible se recomienda emplear el enfoque uniforme por las siguientes razones:

- No requiere especificación extra de variables o funciones, con lo cual, la continuidad en el punto crítico está asegurada dentro de la precisión del método.
- La mayoría de las propiedades termodinámicas requeridas pueden obtenerse del mismo modelo.
- La presencia de gases no condensables no constituye problema alguno.
- La consistencia es una característica inherente del enfoque uniforme.

La mayoría de las ventajas citadas son más significativas cuanto más cerca se está de las condiciones críticas.

1.9.2.2. El Modelo Líquido

Como el enfoque uniforme no es adecuado para el tratamiento de compuestos polares, se hace necesario emplear un enfoque dual, que incorpora los modelos de coeficientes de actividad para tomar en cuenta la no idealidad de la fase líquida.

Al aplicarse el enfoque dual, deberá especificarse el tratamiento para cada fase en forma individual. Para la fase vapor puede usarse cualquiera de las ecuaciones de estado anteriormente citadas, teniéndose en cuenta que para especies de volatilidad relativamente baja, la dependencia de la constante de equilibrio con la composición se debe principalmente a la no idealidad de la fase líquida, por lo que inclusive la ecuación de gas ideal suele dar buenos resultados.

Para el modelado de la fase líquida, la ley de Raoult, aplicable a mezclas líquidas ideales, es el modelo dual más sencillo con un valor de coeficiente de actividad igual a uno. Sin embargo, los sistemas modelizables por esta ley, también suelen serlo sin desviaciones por el enfoque uniforme. Se dice que una mezcla tiene desviaciones positivas o negativas respecto de la idealidad si sus coeficientes de actividad son respectivamente mayores o menores que uno. La forma de algunos

coeficientes de actividad hace que se adecuen para uno u otro tipo de desviación, pero no para ambos.

En general interesa que un modelo de coeficiente de actividad, además de las condiciones del equilibrio líquido vapor, sirva para predecir la existencia de condiciones de inmiscibilidad de la fase líquida (la presencia de otra fase líquida). No todos los modelos más comunes de coeficientes de actividad cumplen con esta condición; los modelos de solución regular y las ecuaciones de Margules y de Wilson, por ejemplo, no pueden predecir la presencia de otra fase líquida.

A continuación se mencionan brevemente las características principales de los modelos de coeficientes de actividad más usados:

1.9.2.3. Modelo de la Solución Regular

Un modelo teórico, muy utilizado para hidrocarburos, es el de la solución regular. En él, se asume que las fuerzas de interacción entre moléculas en solución dependen de la identidad de las mismas que se hallan uniformemente distribuidas en el seno del líquido. Una ventaja de este modelo, es que requiere solamente de las propiedades de los fluidos puros. Como desventajas, sólo predice desviaciones positivas de la idealidad, y no permite determinar separación de fases. Chao y Seader (C-S) desarrollaron una correlación para sistemas regulares a la que luego se le agregó una modificación propuesta por Flory y Huggins para tener en cuenta variaciones del tamaño molecular. La correlación C-S utiliza Redlich-Kwong para el cálculo de ϕ_i^V . Para el cálculo de ϕ_i^L se utiliza BWR. Grayson y Streed presentaron parámetros modificados para BWR, que permitieron aplicar C-S a presiones y temperaturas más altas y especialmente a sistemas con Hidrógeno.

1.9.2.4. Modelo de Van Laar

La ecuación de Van Laar, muy utilizada por su simplicidad, puede simular sistemas azeotrópicos con desviaciones del coeficiente de actividad tanto positivas como negativas, pero sin embargo no puede representar máximos o mínimos del mismo. También puede detectar separación de fases líquidas, aunque a veces erróneamente cuando se trata de compuestos muy polares. Utiliza datos para coeficientes de interacción binaria (A_{ij}), necesarios para sistemas polares, y mantiene el concepto de distribución uniforme.

1.9.2.5. Modelo de Wilson

Para moléculas fuertemente polares, el mezclado ya no es uniforme, y Wilson desarrolló una correlación utilizando parámetros de interacción binaria, y el concepto de composición local, que implica que una molécula de cualquier tipo no necesariamente está rodeada de manera proporcional a las fracciones molares del resto de los componentes. Pese a no poder predecir inmiscibilidad, y máximos o mínimos del coeficiente de actividad, es muy superior para sistemas no ideales a Van Laar, o Margules.

1.9.2.6. Modelo UNIQUAC

La ecuación UNIQUAC (universal quasi-chemical) está basada en la mecánica estadística, y mantiene los parámetros de interacción binaria, el concepto de concentración local, e introduce parámetros representativos del tamaño molecular, lo que la hace apropiada para todos los tipos de sistemas ya mencionados, más aquellos con moléculas de tamaños muy distintos. Para aquellos sistemas de los que no se tienen datos empíricos, existe un modelo teórico de contribución de grupos, llamado **UNIFAC** (universal functional group activity

coeficientes) capaz tanto de calcular el coeficiente de actividad como de suplir los parámetros faltantes al UNIQUAC.

La mayoría de los modelos expresan al coeficiente de actividad como función de la temperatura y de la composición, y en general se desestima el efecto de la presión en el mismo. Por esta razón, a medida que la presión del sistema aumenta, se hace más promisorio el uso de ecuaciones de estado.

Cuando existen componentes no condensables, la fugacidad de referencia de estado estándar no puede ser calculada con precisión, y se emplea por lo general la ley de Henry.

Los principales factores que determinan la aplicabilidad de un método u otro incluyen los rangos de presión y temperatura del proceso en cuestión, el tipo de mezcla, la forma matemática de la correlación y la disponibilidad de datos. También debe tenerse en cuenta que las ecuaciones complejas no son indicadas, en general, para realizar extrapolaciones y que las ecuaciones empíricas, no deben ser empleadas para extrapolaciones.

1.9.2.7. Modelo NRTL

Propuesta por Renon y Prausnitz en 1968, es una extensión de la ecuación de Wilson para sistemas de líquidos inmiscibles. Es la ecuación NRTL (Non- Random -Two-Liquid), debido a que considera que la composición interna del líquido no es aleatoria, sino que las moléculas están semiarregladas.

Con distintas variantes en la cantidad de parámetros, tiene un muy buen desempeño, pudiendo también reproducir máximos o mínimos del coeficiente de actividad.

Ecuación NRTL:

$$\ln \gamma_i = \frac{\sum_{j=1}^n \tau_{ji} x_j G_{ji}}{\sum_{k=1}^n x_k G_{ki}} + \sum_{j=1}^n \frac{x_j G_{ij}}{\sum_{k=1}^n x_k G_{kj}} \left(\tau_{ij} - \frac{\sum_{m=1}^n \tau_{mj} x_m G_{mj}}{\sum_{k=1}^n x_k G_{kj}} \right)$$

Donde:

γ_i : Es el Coeficiente de actividad para el componente i

$$G_{ij} = \exp[-\tau_{ij} \alpha_{ij}]$$

$$\tau_{ij} = \frac{a_{ij} + b_{ij} T}{RT}$$

Donde:

x_i : Fracción mol del componente i .

T : Temperatura (K).

n : Total número de componentes.

a_{ij} : Parámetro de Non de Temperatura dependiente de la energía entre i y j (cal/gmol).

b_{ij} : Parámetro de Temperatura dependiente de la energía entre el componente i y j .

α_{ij} : Constante de Non Randomness para interacciones binarias.

1.9.3 CRITERIO DE SELECCIÓN:

1.9.3.1 Clasificación de Componentes:

Una clasificación más útil fue sugerida por *Ewell* y está basada en la posibilidad que tienen los compuestos de formar o romper enlaces de hidrógeno. Se sabe que la formación de enlaces de hidrógeno está ligada a desviaciones negativas respecto de la idealidad; por el contrario, la ruptura de enlaces de hidrógeno está ligada a desviaciones positivas (Cidre, E., et al 2009).

Tabla 1. Clasificación de los compuestos puros.

| Clase | Descripción | Ejemplos |
|-------|---|--|
| I | Moléculas capaces de formar redes tridimensionales de fuertes enlaces H. | Agua, glicoles, glicerol, amino-alcoholes, hidroxilaminas, hidroxi-ácidos, polifenoles y amidas |
| II | Otras moléculas que contienen átomos hidrógeno activos y átomos dadores (O, N y F) a la vez. | Alcoholes, ácidos, fenoles, aminas primarias y secundarias, oximas, compuestos nitro y nitrilos con átomos α -hidrógeno, amoníaco, hidrazina, fluoruro de hidrógeno y cianuro de hidrógeno. |
| III | Moléculas que contienen átomos dadores pero no átomos de hidrógeno activos. | Éteres, cetonas, aldehídos, ésteres, aminas terciarias (incluidas las tipo piridina) y compuestos nitro y nitrilo sin átomos α -hidrógeno. |
| IV | Moléculas que contienen átomos de hidrógeno activos pero no átomos dadores, que tienen además dos o tres átomos cloro en el mismo átomo carbono en que tienen un átomo hidrógeno, o un átomo cloro en el mismo átomo carbono y uno o más átomos cloro en átomos carbono adyacentes. | CHCl_3 , CH_2Cl_2 , CH_3CHCl_2 , $\text{CH}_2\text{ClCH}_2\text{Cl}$, $\text{CH}_2\text{ClCHClCH}_2\text{Cl}$ y $\text{CH}_2\text{ClCHCl}_2$. |
| V | Todas las restantes moléculas que no tienen ni átomos hidrógeno ni átomos dadores activos. | Hidrocarburos, bisulfuro de carbono, sulfuros, mercaptanos e hidrocarburos halogenados que no pertenecen a la clase IV. |

Fuente: (Cidre, E., et al 2009).

Tabla 2. Clasificación de los compuestos de acuerdo a las desviaciones de la ley de Raoult.

| Clases | Formación de enlace de hidrógeno | Tipo de desviación |
|--|---|--|
| <ul style="list-style-type: none"> • III + IV | Formación exclusiva de enlaces H | Siempre negativa |
| <ul style="list-style-type: none"> • III + III • III + V • IV + IV • IV + V • V + V | No hay presencia de enlaces H | Cuasi ideales, siempre positiva o ideal |
| <ul style="list-style-type: none"> • I + I • I + II • I + III • II + II • II + III | Se forman y se rompen enlaces H | Generalmente positiva, pero algunas mezclas presentan desviaciones negativas |
| <ul style="list-style-type: none"> • I + IV (frecuentemente con solubilidad limitada) • II + IV | Se forman y se rompen enlaces H, pero la disociación de la Clase I o II es un efecto más importante | Siempre positiva |
| <ul style="list-style-type: none"> • I + V • II + V | Sólo se rompen enlaces H | Siempre positiva |

Fuente: (Cidre, E., et al 2009).

Tabla 3. Clasificación del tipo de mezclas según la aplicabilidad de los modelos.

| Grupo | Componentes | | Par asociado (ejemplo) | Parámetros | | |
|-------|---|--|---|--------------------|--------------------|--------------------|
| | Presencia | Ausencia | | Asoc. ¹ | Asoc. ² | Solv. ³ |
| I | Clase V | Fluorocarburos Clases I, IV | Benzeno - Pentano Ciclohexano - CCl ₄ | 0 0 | 0 0 | 0 0 |
| II | Hidrocarburos Fluorocarburos | Clases I, IV | C ₆ F ₁₄ - C ₆ H ₁₄ | | 0 | |
| III | Clase III Clase V | Clases I, II, IV Compuestos de Nitrógeno o nitrilos | Acetato de Etilo - Hexano Acetona - CCl ₄ | 0.53 0.8 | 0 0 | 0 0.2 |
| IV | Clase III Clase I Compuestos de Nitrógeno o nitrilos | Clases I, II, IV | Nitrometano - Hexano Acetonitrilo - CCl ₄ | 1.66 1.65 | 0 0 | 0 0.3 |
| V | Clase III | Clases I, II, IV | Nitrometano - Acetona Acetona - acetonitrilo | 1.66 0.8 | 0.8 1.65 | 1.63 1.3 |
| VI | Clase III Clase IV | Clases I, II | CHCl ₃ - Acetona CH ₂ Cl ₂ - Acetato de etilo | 0 0 | 0.8 0.53 | 1.26 0.5 |
| VII | Clases I, II Hidrocarburos saturados | Clases III, IV Hidrocarburos no saturados | Metanol - Hexano Etanol - Ciclohexano | 1.63 1.4 | 0 0 | 0 0 |
| VIII | Clases I, II Hidrocarburos no saturados | Clases II, IV | Metanol - Benceno Etanol - CCl ₄ | 1.63 1.4 | 0 0 | 0 0 |
| IX | Clases I, II Clase III | | Metanol - Nitrometano Etanol - Acetona | 1.63 1.4 | 1.66 0.8 | 1.2 1 |
| X | Clases I, II Clase IV | | Metanol - CHCl ₃ Etanol - Piridina | 1.63 1.4 | 0 0 | 0.1 0.4 |
| XI | Agua Clase III | Compuestos asociados | Agua - Acetona | 1.7 | 0.9 | 1 |
| XII | Agua Clases I, II | | Agua - Etanol | 1.7 | 1.4 | 1.55 |

(1) Parámetro de asociación 1^{er} compuesto (2) Parámetro de asociación 2^{do} compuesto (3) parámetro de solvatación

Fuente: (Cidre, e., et al 2009).

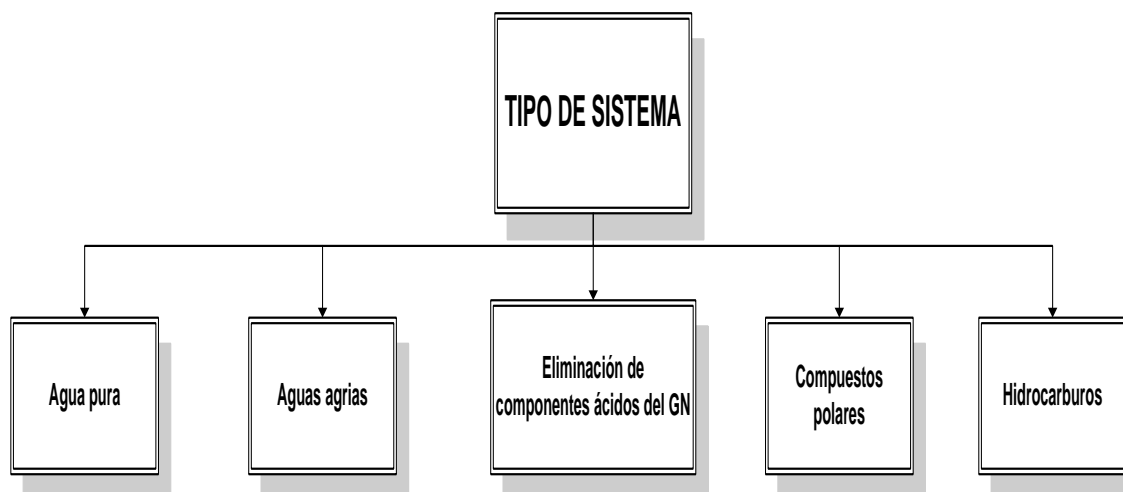
Tabla 4. Precisión esperada para los modelos líquidos.

| Modelo | Número de Grupo | | | | | | | | | | | |
|---------------------|-----------------|------|-----|------|----|------|-----|------|------|------|-----|-----|
| | I | II | III | IV | V | VI | VII | VIII | IX | X | XI | XII |
| Margules 2-sufijos | MB | R-B | B | M-R | B | R-B | M | R | R-B | M-R | M | R |
| Margules 3-sufijos | E | B-MB | MB | B | MB | B-MB | R | B | B | B | R-B | B |
| van Laar | E | MB | MB | B-MB | MB | MB | R-B | B | B-MB | B | R-B | B |
| Solución regular | MB | M-R | B | M-R | B | M | M | R | R-B | M | M | M |
| Wilson 2 parámetros | E | MB | E | MB-E | E | MB | E | E | E | MB | MB | MB |
| Wilson 1 parámetro | E | B | MB | R | MB | MB | R | B | MB | R | R | B |
| NRTL 2 parámetros | E | MB | E | MB | E | MB | MB | E | E | MB | MB | MB |
| NRTL 3 parámetros | E | MB | E | MB-E | E | MB | MB | E | E | MB-E | MB | MB |
| NRTL 1 parámetro | E | B | MB | R-B | MB | MB | R | B | MB | B | R | MB |
| UNIQUAC | E | MB | E | MB-E | E | MB | MB | E | E | E | MB | MB |

E: Excelente; MB: Muy Bueno, B: Bueno; R: Regular; M: Malo

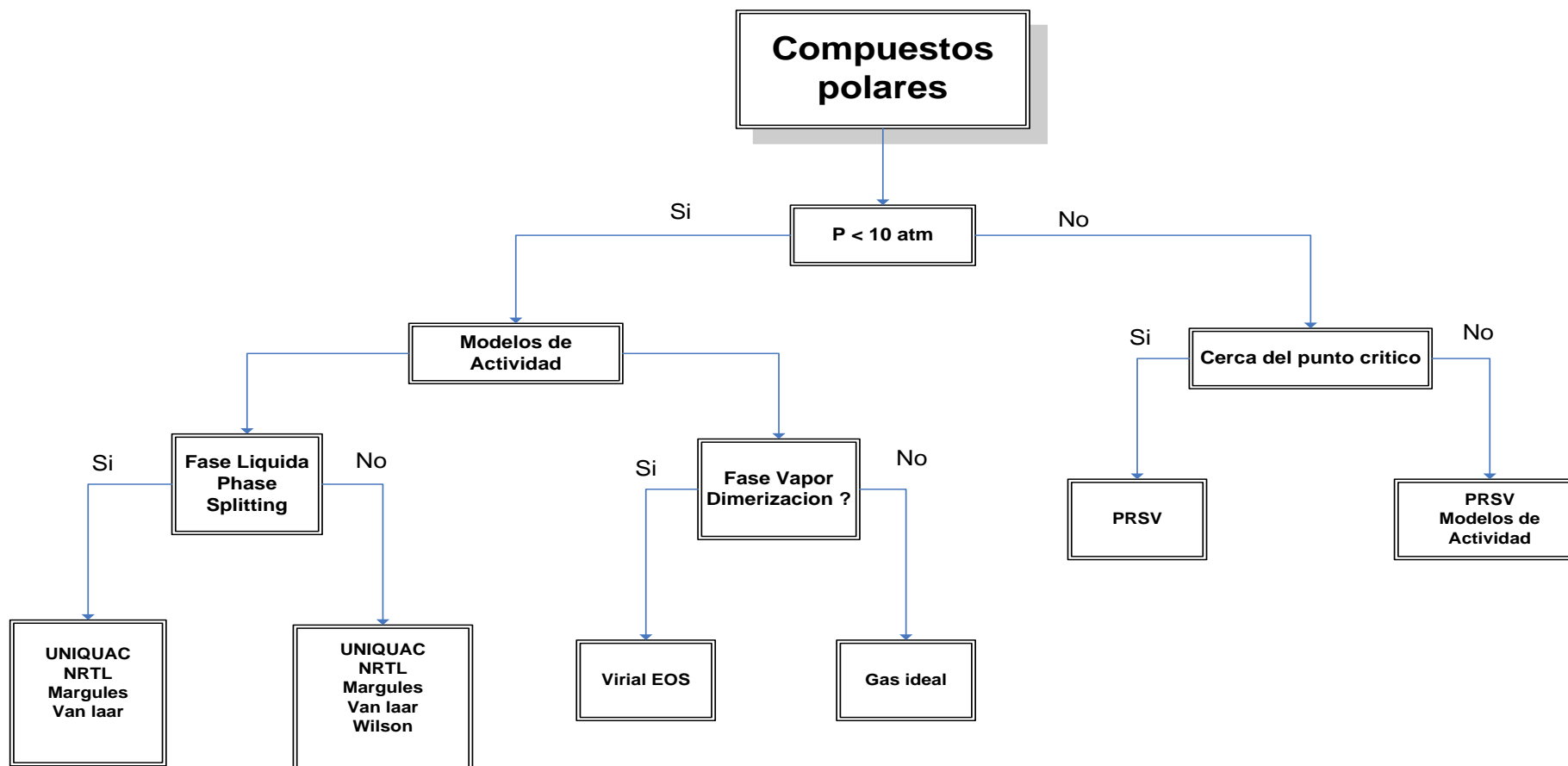
Fuente: (Cidre, E., et al 2009).

Tabla 5. Diagrama de árbol para la selección del modelo termodinámico.



Fuente: (Cidre, E., et al 2009).

Tabla 6. Diagrama de árbol de compuestos polares.



Fuente: (Cidre, E., et al 2009).

Todos los solventes a tener en cuenta pertenecen a la familia de los alcoholes por lo que se considerara el sistema formado por especies alcohólicas y agua.

Debido a la presencia de alcoholes y del agua; el sistema es de naturaleza polar.

Para reducidas presiones (1 atm en la columna de extracción, y 10 Kpa en la columna recuperadora) y para temperaturas entre 120 y 150 °C, se supone un comportamiento de gas ideal para la fase vapor y un comportamiento no ideal para la fase líquida; siendo así el modelo a utilizar tendrá que ser un modelo de actividad, por lo que se utilizara un enfoque dual ya que se tendrá que modelar por separado las dos fases.

Haciendo uso de un árbol de selección y del método propuesto por Ewell, se tiene que el modelo que mejor correlaciona los datos experimentales es el modelo NRTL, además se debe tener en cuenta que éste mismo modelo es utilizado en trabajos de simulación que implica equilibrio de fases líquido vapor para sistemas de Agua-Etanol, (Meirelles, A., 1992; Uyazán, A., 2006), lo cual refuerza aún más la elección propuesta.

CAPÍTULO II

MATERIAL DE ESTUDIO, METODO Y TECNICA

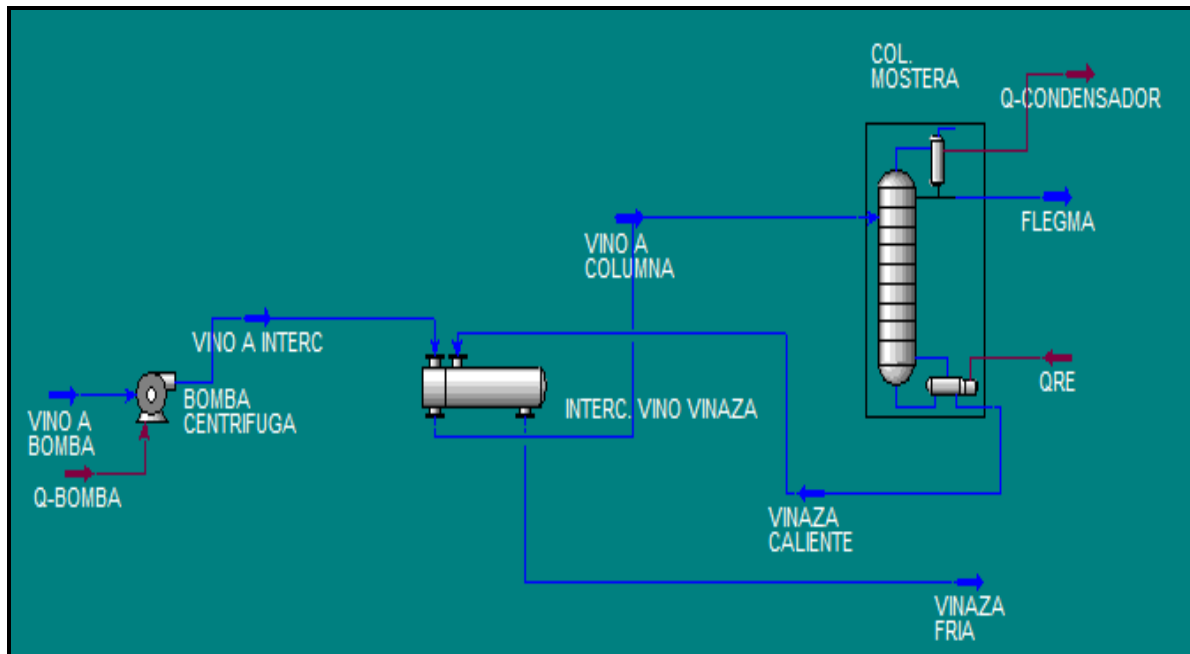
2.1. MATERIAL DE ESTUDIO.

El sistema de estudio está conformado por la unidad de operación de la columna mostera, la cual está conformado por: una bomba centrífuga, un intercambiador de casco y tubos y una columna de destilación con su respectivo rehervidor y condensador, todo ello perteneciente a la destilería de la empresa Maple Etanol.

La información necesaria para llevar a cabo la optimización mediante simulación del proceso de destilación de la columna mostera, fue obtenida de las áreas de control de calidad y producción.

Los datos correspondientes a las parámetros de operación tales como: flujo de vino y vapor, temperaturas, presiones y concentración de etanol en la vinaza fueron obtenidos en el área de control de calidad de la Planta Maple Etanol durante el mes de Setiembre del año 2014, por ser este el más parejo en cuanto a producción continua, por otro lado, los datos correspondientes a las variables de diseño, tales como: altura, diámetro, número de platos, plato de alimentación y espaciado entre platos, de la columna utilizadas para las corridas de simulación fueron brindadas por el área de producción de la mencionada empresa.

Fig. 4. Sistema de Estudio: Unidad de Operación de Col. Mostera.



Fuente: (Elaboración Propia).

2.2. MÉTODOS Y TÉCNICAS

2.2.1. Método

El método a utilizar es el método computacional, ya que se llevara a cabo utilizando un ordenador.

Las principales características del Ordenador son:

- Computadora Laptop marca Acer
- Velocidad de microprocesador: 4 Ghz.
- Memoria Ram: 4.0 Gb.
- Disco Duro: 500 Gb.

2.2.2. Técnica:

La técnica utilizada para desarrollar el presente trabajo fue la simulación de procesos., en este caso, el simulador de procesos químicos usado es: Hysys 3.0.1.

2.3. VARIABLES

| Independientes | Dependientes |
|---------------------------------|------------------------------------|
| Temperatura de fondo de columna | Composición de etanol en el vinaza |
| Temperatura de ingreso de vino | Consumo energético |
| Presión de ingreso de vino | |
| Flujo de vapor | |
| Flujo de vino | |

2.4. RESTRICCIONES

- Composición volumétrica máxima de Etanol en la vinaza 0.05% V/V
- Mínimo consumo energético en los rehervidores de la columna mostera.

2.5. PROCEDIMIENTO

El análisis realizado se centra básicamente en la columna mostera la cual es la encargada de despojar el alcohol del vino.

Se utilizan los parámetros de operación promedio correspondientes al mes de Setiembre del 2014, y los datos de variables de diseño de la columna, como datos de entrada, (Ver anexo), para realizar una corrida inicial la cual nos sirve para validar el modelo simulado, al comparar los datos de salida obtenidos mediante simulación tales como flujos y temperaturas con los datos reales; seguido a esto se realizaron ocho análisis de sensibilidad para determinar el impacto que se tiene al variar en rangos razonables los parámetros de las variables tales como presión, flujo y temperatura de entrada de vino, sobre el consumo energético y la concentración de etanol en la vinaza que sale de la columna mostera.

Por otro lado una vez analizado el impacto de los parámetros de operación sobre las restricciones, se determinan las condiciones de operación óptimas que cumplan con las restricciones.

Finalmente se utilizan estos valores en una corrida final que muestra los parámetros óptimos encontrados mediante la simulación del proceso de operación de la columna mostera del sistema de destilación Maple Etanol.

CAPITULO III

SIMULACION Y OPTIMIZACION

3.1. SIMULACIÓN DE LA COLUMNA MOSTERA

Como criterios de operación eficiente, se determinan, para la realización de las simulaciones, un contenido de alcohol no mayor de 0.05% v/v en la vinaza y el menor consumo energético posible.

El modelo termodinámico utilizado para las simulaciones fue el NRTL por ser este el más adecuado, ya que es el que mejor correlaciona los datos experimentales. (Meirelles, A., 1992; Uyazán, A., 2006).

3.2. DATOS DE ENTRADA

Tal como se señaló en el capítulo dos, los datos de entrada correspondientes a los parámetros de operación promedio, son obtenidos de la base de datos del área de control de calidad y corresponden al mes de Setiembre del año 2014 y se muestran a continuación:

a) Parámetros de Operación

Cuadro 1. Parámetros de Operación para la simulación.

| Ítem | Variable | Unidad | Dato Promedio |
|------|------------------------------|-------------------|-----------------------------|
| 1 | Componentes | - | Etanol-Agua |
| 2 | Paquete termodinámico | - | NRTL |
| 3 | Temp. ingreso vino a bomba | °C | 25.0 |
| 4 | Temp. ingreso de vino a Col. | °C | 90.7 |
| 5 | Presión ingreso vino a bomba | bar | 1.0 |
| 6 | Presión ingreso vino a Col. | bar | 1.4 |
| 7 | Flujo de vino | m ³ /h | 160.6 |
| 8 | Grado de Vino | % v/v | 8.31 (0.0275 Frac. Mol-Et.) |

Fuente: Departamento de Control de Calidad-Maple Etanol.

b) Variables de diseño

Por su parte los datos referidos a las variables de diseño son obtenidos de las hojas de especificaciones obtenidas de Área de Producción y son los siguientes:

Cuadro 2. Variables de diseño para la bomba.

| Ítem | Especificación | Unidad | Valor |
|------|------------------|--------|-----------------|
| 1 | Tipo | - | Centrifuga |
| 2 | Tipo de impulsor | - | Semi abierto |
| 3 | Material | - | Acero -inox-304 |
| 4 | Cabeza total | M | 50 |
| 5 | Velocidad | Rpm | 3500 |
| 6 | Eficiencia | % | 75 |

Fuente: Departamento de Producción-Maple Etanol.

Cuadro 3. Variables de diseño para el intercambiador de calor.

| Ítem | Especificación | Unidad | Valor |
|------|------------------------|--------|---------------|
| 1 | Tipo | - | Casco y Tubos |
| 2 | Caída de presión tubos | bar | 0.1 |
| 3 | Caída de presión casco | bar | 0.1 |
| 4 | N° pasos casco | u. | 2 |
| 5 | N° pasos tubo | u. | 2 |
| 6 | Diámetro casco | mm. | 1896 |
| 7 | N° Tubos | u. | 1100 |
| 8 | Arreglo de tubos | - | Triangular |
| 9 | Diámetro interior | mm. | 25.3 |
| 10 | Diámetro exterior | mm. | 28.3 |
| 11 | Longitud de tubo | m. | 6 |
| 12 | Conductividad térmica | W/m.K | 45 |

Fuente: Departamento de Producción-Maple Etanol.

Cuadro 4. Variables de diseño para la columna mostera.

| Ítem | Especificación | Unidad | Valor |
|------|---------------------------|--------|------------|
| 1 | Tipo | - | Platos |
| 2 | Forma | - | Cilíndrica |
| 3 | Diámetro | m. | 1.5 |
| 4 | Altura de columna | m. | 14 |
| 5 | N° Platos | u. | 23.0 |
| 6 | Palto de alimentación | - | 22.0 |
| 7 | Espaciado entre platos | M | 0.55 |
| 8 | Tipo de condensador | - | Total |
| 9 | Caída de presión cond. | Bar | 0.1 |
| 10 | Caída de presión reboiler | Bar | 0.1 |
| 11 | Relación de reflujo | - | 0.5 |

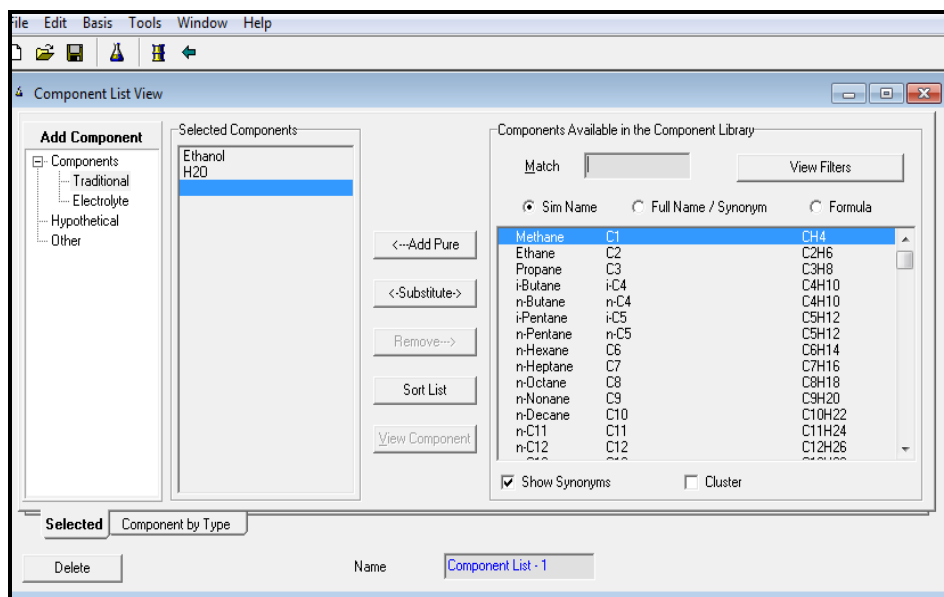
Fuente: Departamento de Producción-Maple Etanol.

3.3. SIMULACIÓN DE LA OPERACIÓN DE LA COLUMNA MOSTERA

3.3.1. Ingreso de componentes y selección del paquete termodinámico

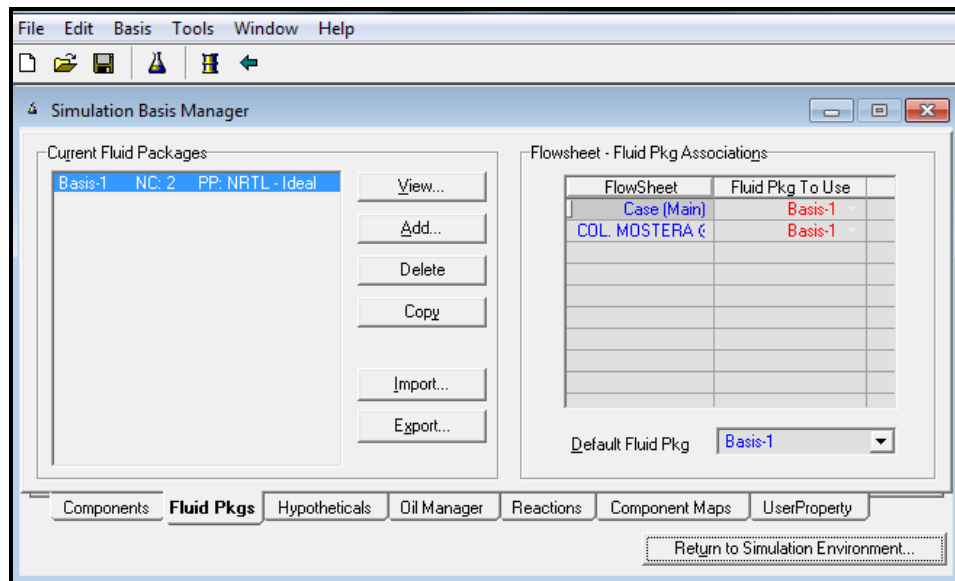
Para el tema de los componentes se asume que tanto el vino como la vinaza solo tienen como componentes al etanol y al agua, ya que éstos se encuentran en mayor cuantía.

Fig. 5. Pantalla que muestra el ingreso de los componentes.



Fuente: Hysys 3.01

Fig. 6. Pantalla que muestra la selección del paquete termodinámico a utilizar.

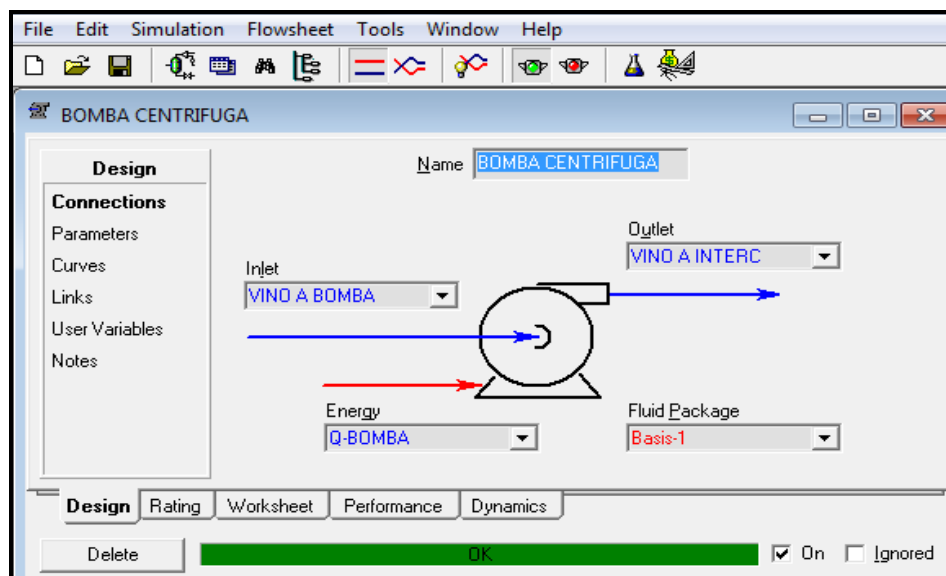


Fuente: Hysys 3.01

3.3.2. Datos de Entrada para la bomba

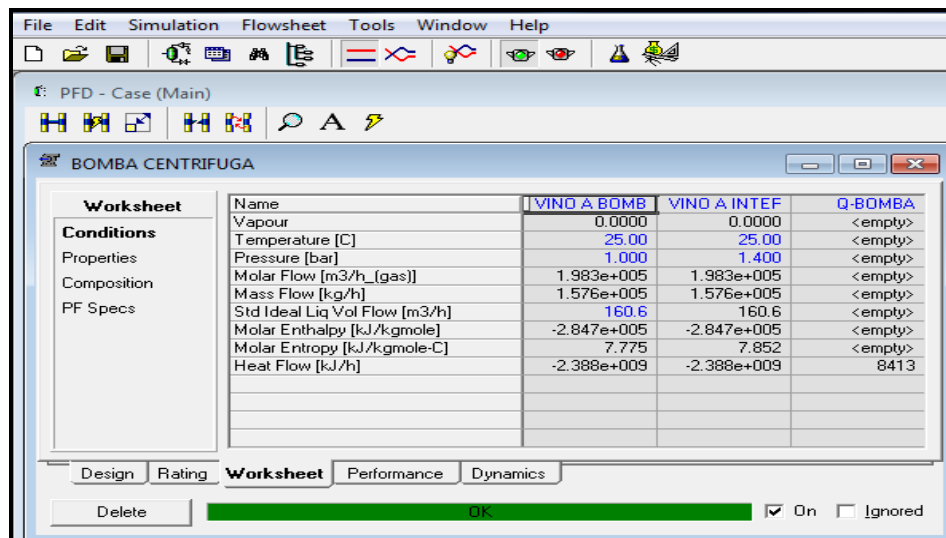
Para la bomba centrífuga, se considera una eficiencia del 75% , velocidad de 3500 rpm y cabeza total 50 m.

Fig. 7. Pantalla que muestra las conexiones para la bomba de vino.



Fuente: Hysys 3.01

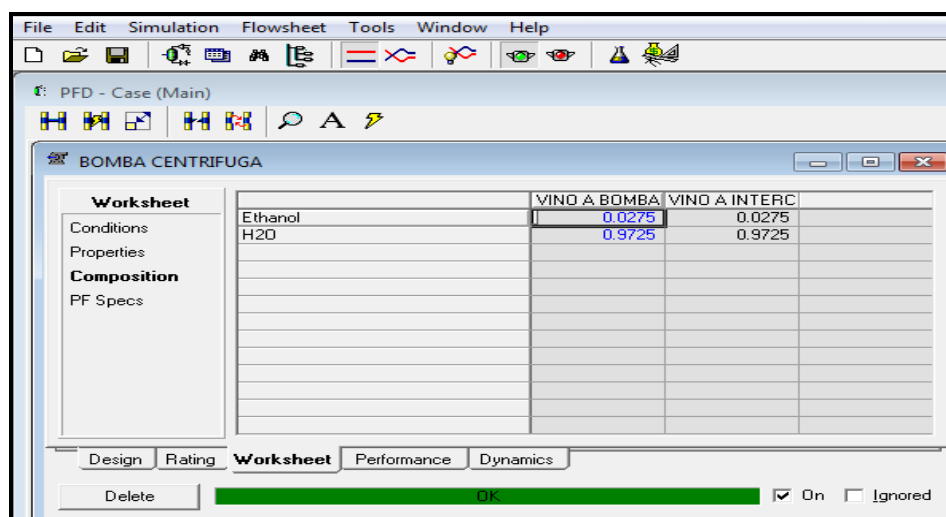
Fig. 8. Pantalla que muestra las condiciones de entrada y salida del vino.



| | VINO A BOMBA | VINO A INTERF | Q-BOMBA |
|-------------------------------|--------------|---------------|---------|
| Name | | | |
| Vapour | 0.0000 | 0.0000 | <empty> |
| Temperature [C] | 25.00 | 25.00 | <empty> |
| Pressure [bar] | 1.000 | 1.400 | <empty> |
| Molar Flow [m3/h_(gas)] | 1.983e+005 | 1.983e+005 | <empty> |
| Mass Flow [kg/h] | 1.576e+005 | 1.576e+005 | <empty> |
| Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h] | 160.6 | 160.6 | <empty> |
| Molar Enthalpy [kJ/kgmole] | -2.847e+005 | -2.847e+005 | <empty> |
| Molar Entropy [kJ/kgmole-C] | 7.775 | 7.852 | <empty> |
| Heat Flow [kJ/h] | -2.388e+009 | -2.388e+009 | 8413 |

Fuente: Hysys 3.01

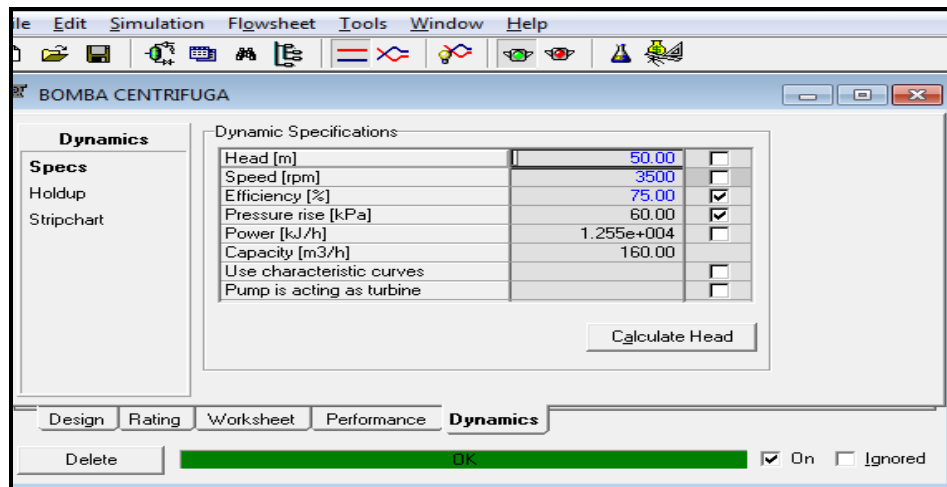
Fig. 9. Pantalla que muestra la composición de los componentes a la entrada.



| | VINO A BOMBA | VINO A INTERC |
|---------|--------------|---------------|
| Ethanol | 0.0275 | 0.0275 |
| H2O | 0.9725 | 0.9725 |
| | | |
| | | |
| | | |
| | | |
| | | |
| | | |
| | | |
| | | |
| | | |
| | | |
| | | |
| | | |

Fuente: Hysys 3.01

Fig. 10. Pantalla que muestra las especificaciones técnicas de diseño de la bomba.

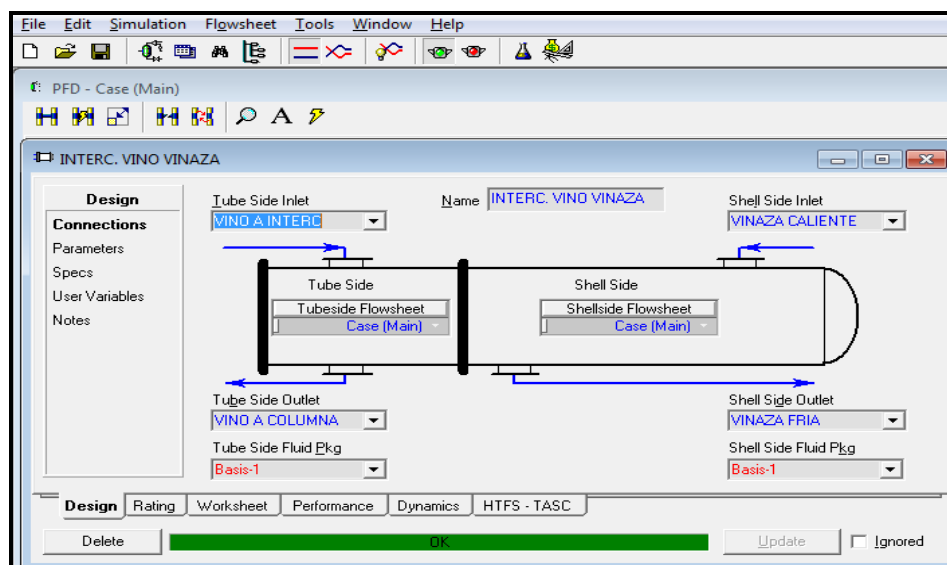


Fuente: Hysys 3.01

3.3.3. Ingreso de datos para el intercambiador de calor vino/vinaza

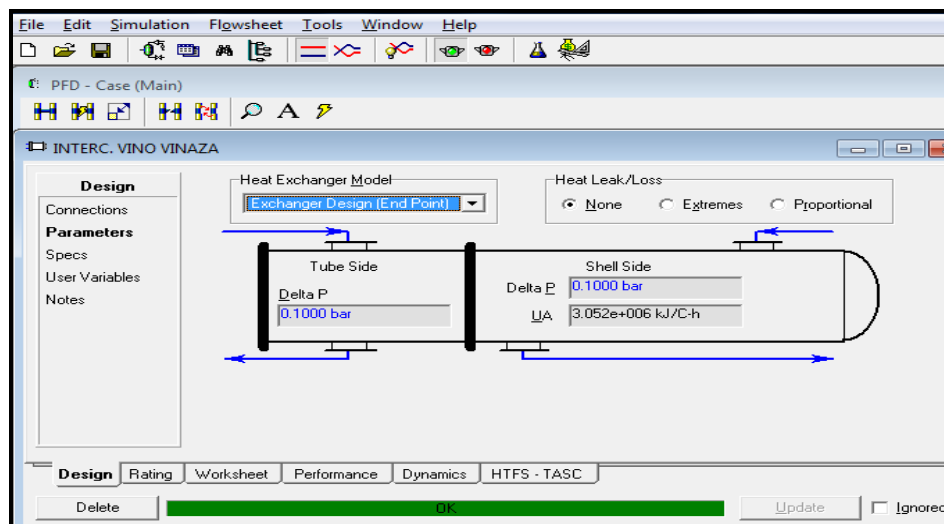
El intercambiador de calor es del tipo casco y tubos, dispuesto de forma horizontal, con dos pasos en el casco y dos pasos en los tubos, con 1100 tubos dispuestos de forma triangular, con diametro interior 25.3 mm, longitud 6 m y de acero inoxidable -316.

Fig. 11. Pantalla que muestra las conexiones del intercambiador.



Fuente: Hysys 3.01

Fig. 12. Pantalla que muestra el ingreso de las caídas de presión en casco y tubos.



Fuente: Hysys 3.01

Fig. 13. Pantalla que muestra las condiciones de entrada y salida del equipo.

| Name | VINO A INTER | VINO A COLU | VINAZA CALIE | VINAZA FRIA |
|-------------------------------|--------------|-------------|--------------|-------------|
| Vapour | 0.0000 | 0.0000 | 0.0000 | 0.0000 |
| Temperature [C] | 25.00 | 90.70 | 109.2 | 35.46 |
| Pressure [bar] | 1.400 | 1.300 | 1.400 | 1.300 |
| Molar Flow [m3/h_(gas)] | 1.983e+005 | 1.983e+005 | 1.822e+005 | 1.822e+005 |
| Mass Flow [kg/h] | 1.576e+005 | 1.576e+005 | 1.389e+005 | 1.389e+005 |
| Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h] | 160.6 | 160.6 | 139.2 | 139.2 |
| Molar Enthalpy [kJ/kgmole] | -2.847e+005 | -2.796e+005 | -2.785e+005 | -2.841e+005 |
| Molar Entropy [kJ/kgmole-C] | 7.852 | 24.07 | 25.46 | 9.210 |
| Heat Flow [kJ/h] | -2.388e+009 | -2.345e+009 | -2.146e+009 | -2.189e+009 |

Fuente: Hysys 3.01

Fig. 14. Pantalla que muestra el ingreso de variables de diseño del intercambiador.

INTERC. VINO VINAZA

Rating

Sizing

Parameters

Sizing Data

☒ Overall ☐ Shell ☐ Tube

☐ Accept any input data

Configuration

| | |
|--------------------------------|------------|
| Number of Shell Passes | 1 |
| Number of Shells in Series | 2 |
| Number of Shells in Parallel | 1 |
| Tube Passes per Shell | 2 |
| Exchanger Orientation | Horizontal |
| First Tube Pass Flow Direction | Counter |
| Elevation (Base) | 0.0000 |

TEMA Type: A E L

Calculated Information

| | |
|--|------------|
| Shell HT Coeff [kJ/h-m ² -C] | <empty> |
| Tube HT Coeff [kJ/h-m ² -C] | <empty> |
| Overall UA [kJ/h-m ² -C] | 2600 |
| Overall UA [kJ/C-h] | 3.052e+006 |
| Shell DP [bar] | 0.1000 |
| Tube DP [bar] | 0.1000 |
| Heat Trans. Area per Shell [m ²] | 596.8 |
| Tube Volume per Shell [m ³] | 3.318 |
| Shell Volume per Shell [m ³] | 12.80 |

Design Rating Worksheet Performance Dynamics HTFS - TASC

Delete OK Update Ignored

Fuente: Hysys 3.01

Fig. 15. Pantalla que muestra las variables de diseño del intercambiador.

INTERC. VINO VINAZA

Rating

Sizing

Parameters

Sizing Data

☐ Overall ☒ Shell ☐ Tube

☐ Accept any input data

Shell and Tube Bundle Data

| | |
|--|-------------------------|
| Shell Diameter [mm] | 1896.60 |
| Number of Tubes per Shell | 1100 |
| Tube Pitch [mm] | 50.00 |
| Tube Layout Angle | Triangular (30 degrees) |
| Shell Fouling [C-h-m ² /kJ] | 0.000000 |

Shell Baffles

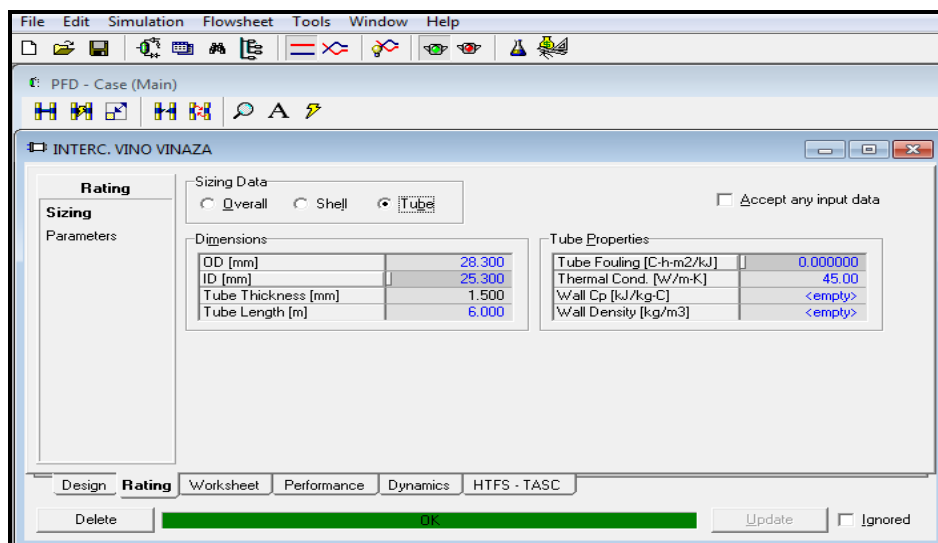
| | |
|--------------------------|------------|
| Shell Baffle Type | Single |
| Shell Baffle Orientation | Horizontal |
| Baffle Cut (%Area) | 20.00 |
| Baffle Spacing [mm] | 800.00 |

Design Rating Worksheet Performance Dynamics HTFS - TASC

Delete OK Update Ignored

Fuente: Hysys 3.01

Fig. 16. Pantalla que muestra las variables de diseño del intercambiador.

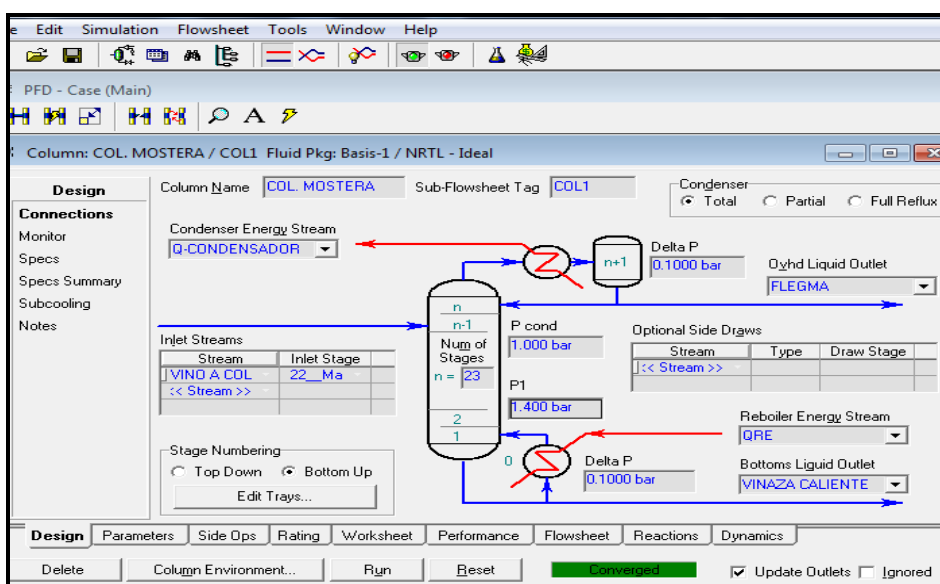


Fuente: Hysys 3.01

3.3.4. Ingreso de datos para la columna mostera

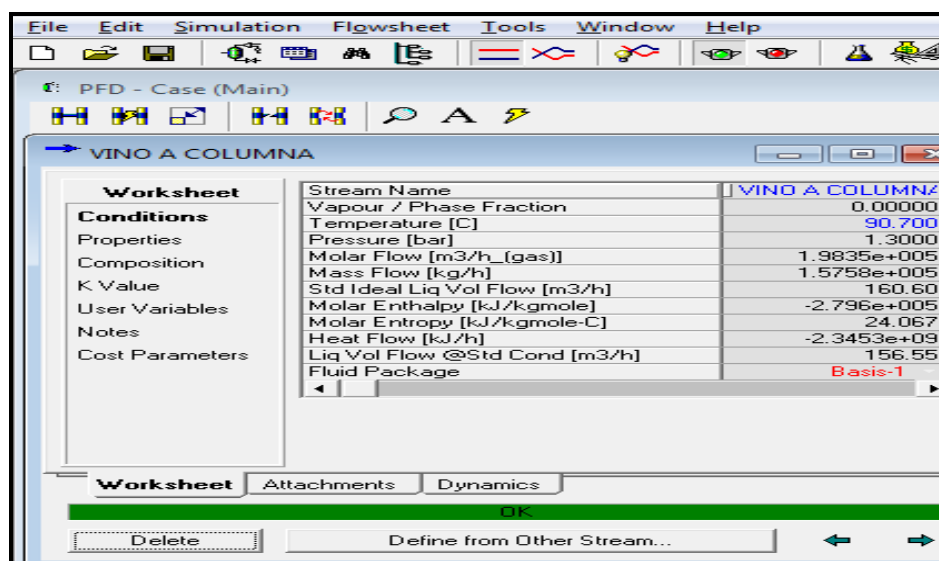
La columna mostera tiene forma cilíndrica y esta constituida por 23 platos perforados, con un espaciamiento entre plato de 0.55 m, consta de un condensador que opera a reflujo total con una razón de reflujo mínima de 0.5 molar y consta de, un reboiler el cual utiliza como fuente de calor vapor saturado de baja presión (1.5 bar), proveniente del área de turbina.

Fig. 17. Pantalla que muestra las conexiones para la columna mostera.



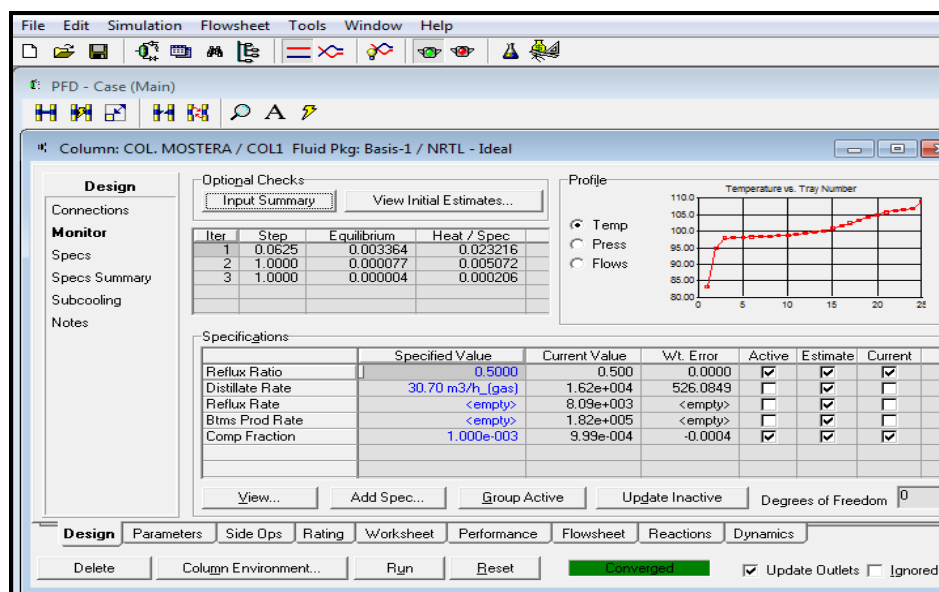
Fuente: Hysys 3.01

Fig. 18. Pantalla que muestra las condiciones de ingreso del vino a la columna.



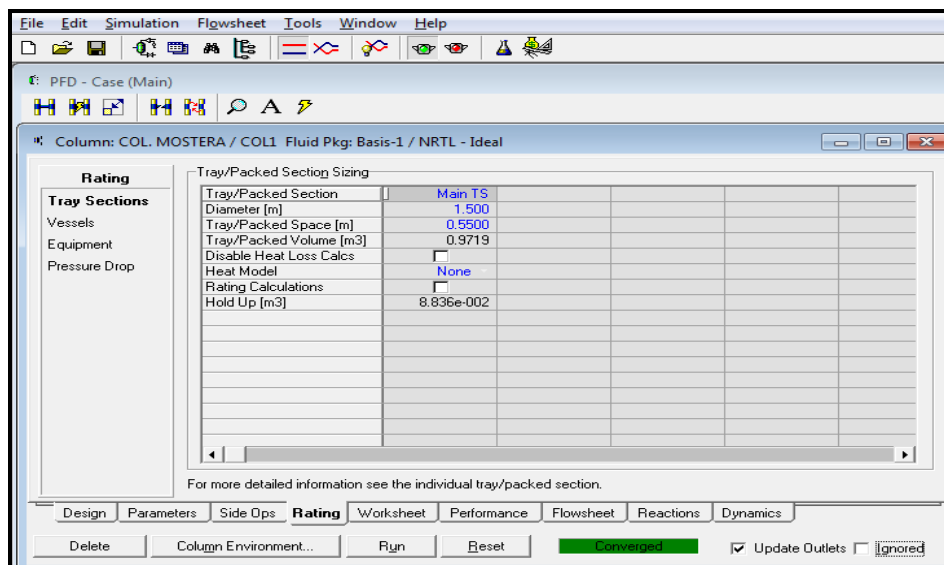
Fuente: Hysys 3.01

Fig. 19. Pantalla que muestra el ingreso de la relación de reflujo, flujo de destilado y fracción volumen de etanol en la vinaza.



Fuente: Hysys 3.01

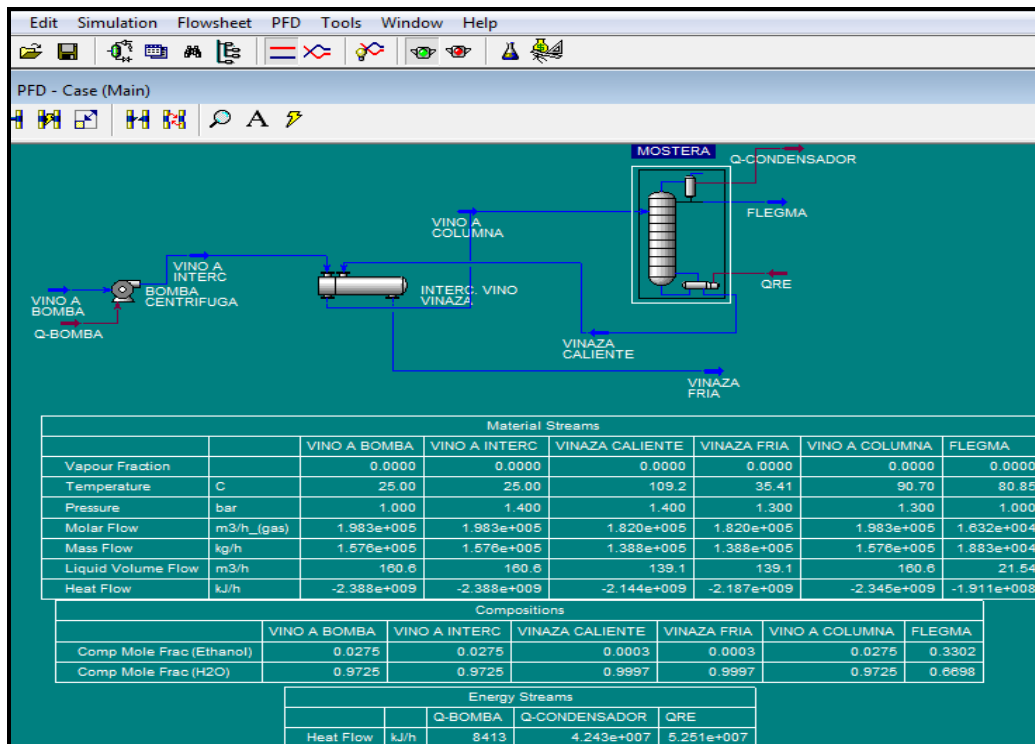
Fig. 20. Pantalla que muestra el ingreso de variables de diseño de la columna mostera



Fuente: Hysys 3.01

3.3.5. Corrida Inicial realizada con los datos de entrada

Fig. 21. Pantalla que muestra la corrida inicial de la unidad de operación-Col. Mostera.



Fuente: Hysys 3.01

3.4. COMPARACIÓN DE RESULTADOS

Cuadro 5. Comparación de parámetros reales vs. Obtenidos por simulación.

| Tipo de Datos | Corriente | Flujo (m ³ /h) | Temperatura (°C) |
|----------------|-----------|---------------------------|------------------|
| Reales | Vinaza | 133.63 | 109.39 |
| Simulados | | 139.1 | 109.2 |
| Reales | Flegma | 22.56 | 79.16 |
| Simulados | | 21.54 | 80.85 |
| Error Rel. (%) | Vinaza | 4.09 | 0.17 |
| | Flegma | 4.52 | 2.13 |

Fuente: Elaboración propia.

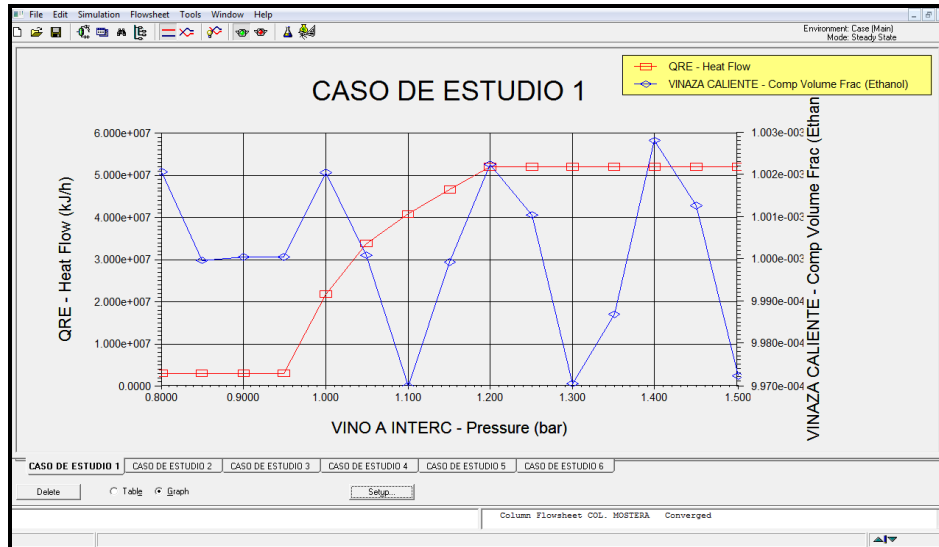
Se observa que para el flujo y la temperatura tanto de la vinaza como de la flegma, se tiene un error porcentual menor al 5%, lo cual sirve como referente para validar el modelo simulado.

3.5. OPTIMIZACIÓN MEDIANTE ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD

Cabe resaltar que tanto la presión y flujo de vapor no son variables independientes ya que dependen de la funcionalidad y la operación del área de caldera y turbina por lo que no son relevantes para el análisis.

3.5.1. Análisis de la influencia de la presión del vino sobre la composición de vinaza y el gasto energético en la columna mostera

Fig. 22. Caso de Estudio n° 1.

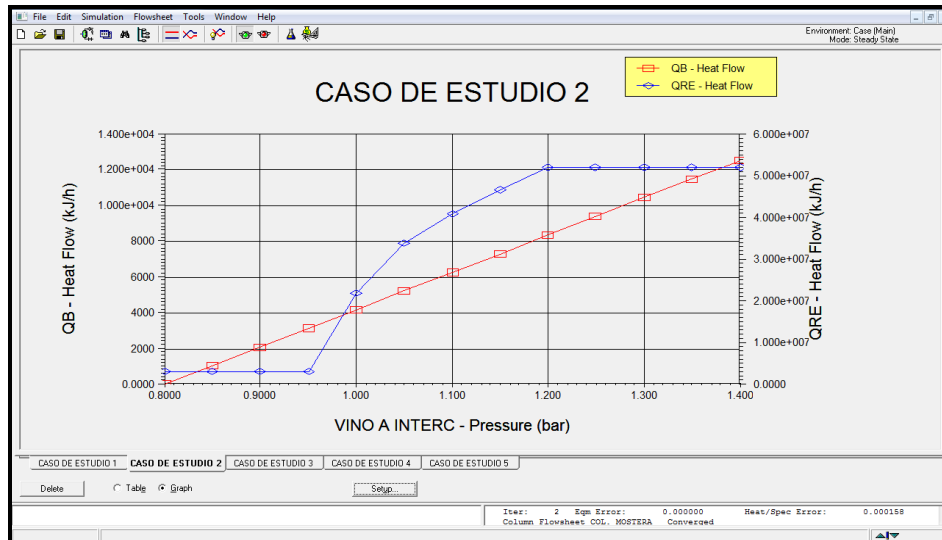


Fuente: Hysys 3.01

Se observa que a medida que se incrementa la presión en la línea de ingreso de vino al intercambiador vino-vinaza, la composición de alcohol en la vinaza sufre altibajos que van de $9.97 \text{ E-}3$ a $1.003 \text{ E-}3$ (fracción volumen), lo cual a pesar de mostrar un comportamiento irregular no es significativo en tanto que las variaciones son despreciables ya que la variación oscila alrededor del 0.6%; por otro lado, para presiones entre 0.8 y 0.9 bar el consumo energético se mantiene constante sin embargo a medida que se incrementa la presión el gasto energético se incrementa en forma logarítmica, finalmente a partir de 1.2 bar el consumo energético se mantiene constante; por ello teniendo en cuenta que el vino debe ingresar a una presión ligeramente mayor a la de la columna, se determina que la presión ideal debe ser 1.1 bar.

3.5.2. Análisis de la influencia de la presión del vino sobre el gasto energético de la bomba y del reboiler

Fig. 23. Caso de Estudio n° 2.

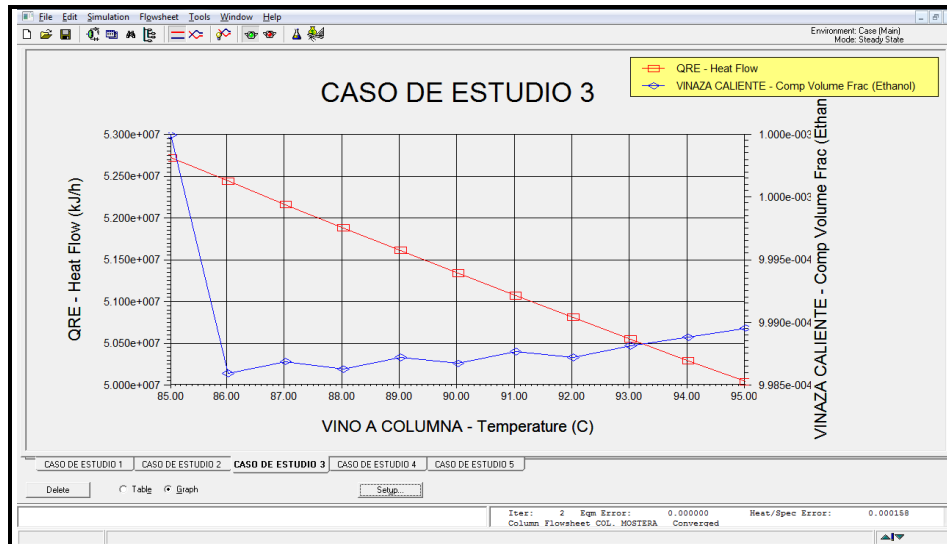


Fuente: Hysys 3.01

En éste análisis se observa como es de esperar que a medida que se incremente la presión de ingreso de vino a la columna tanto el consumo energetico en la bomba como en el reboiler se incrementan, para el caso de la bomba la relación es lineal mientras que para el reboiler se mantiene lineal en el rango de 0.8 a 0.95 bar y luego experimenta un cambio logarítmico hasta 1.2 bar, y a partir de este punto se mantiene constante en 5 E7 KJ/h. Por lo tanto con esta grafica se reafirma que la presión ideal debería ser 1.1 bar.

3.5.3. Análisis de la influencia de la temperatura del vino sobre la composición de la vinaza y el gasto energético del reboiler

Fig. 24. Caso de Estudio n° 3.

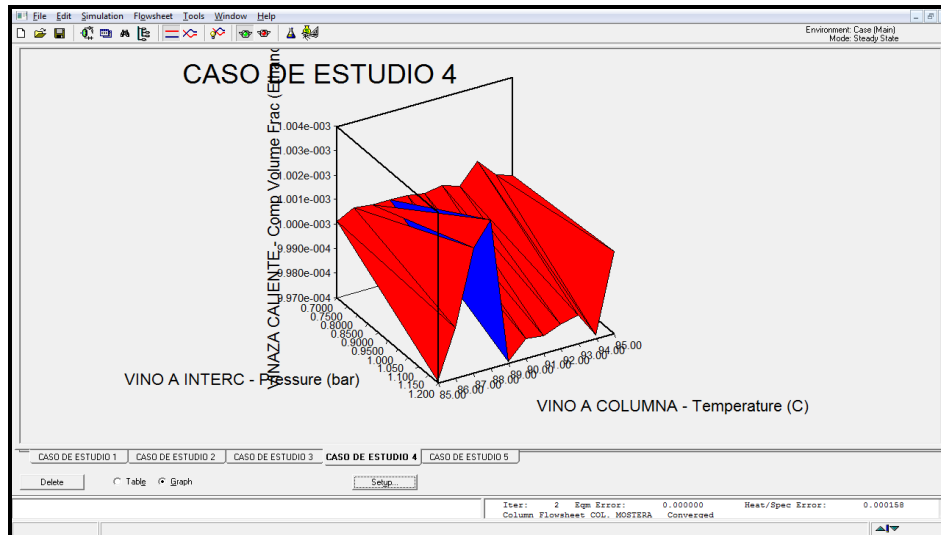


Fuente: Hysys 3.01

En esta grafica se observa que a medida que aumenta la temperatura de ingreso de vino a la columna se reduce de forma lineal el gasto energetico en el reboiler, por otro lado la concentración de alcohol en la vinaza permanece casi constante, bajo esta premisa se determina que la temperatura ideal debe ser alrededor de 93°C, a fin de reducir el consumo energético.

3.5.4. Análisis conjunto de la presión y temperatura del vino sobre la composición de la vinaza

Fig. 25. Caso de Estudio n° 4.

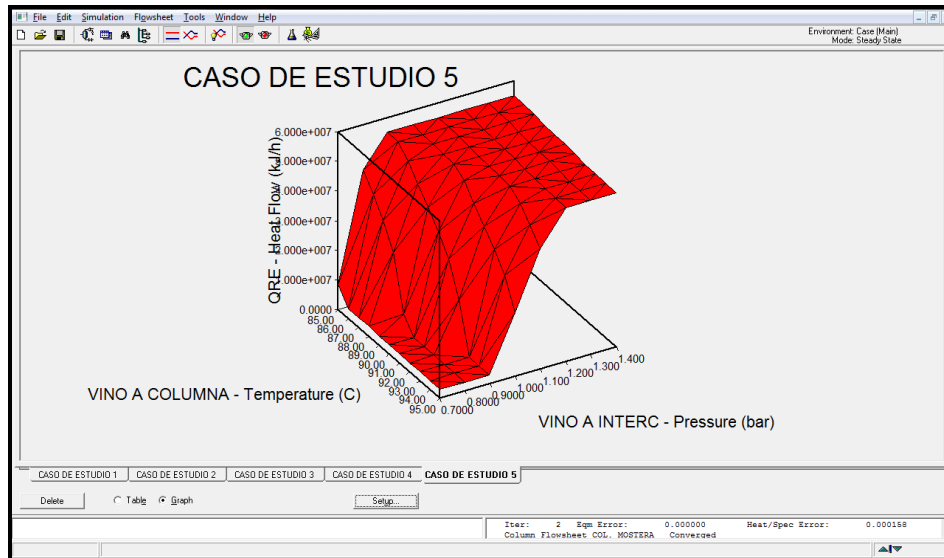


Fuente: Hysys 3.01

En la siguiente grafica se realiza un analisis de la influencia conjunta de la presión y de la temperatura sobre la concentración del etanol en la vinaza, observandose que para combinaciones de temperaturas mayores a 90°C y presiones mayores a 1.0 bar se obtienen los valores mas bajos de concentración de etanol en la vinaza; asi por ejemplo para una temperatura de 94°C y una presión de 1.15 bar se obtiene una compoción de etanol de 9.97 E-4 fracción volumen; por lo cual se ratifica que las condiciones de temperatura y presión mas favorables para reducir la concentración de alcohol en la vinaza optimizando el consumo energetico es de 93°C y 1.1 bar.

3.5.5. Análisis conjunto de la presión y temperatura del vino sobre el consumo energético del reboiler

Fig. 26. Caso de Estudio n° 5.

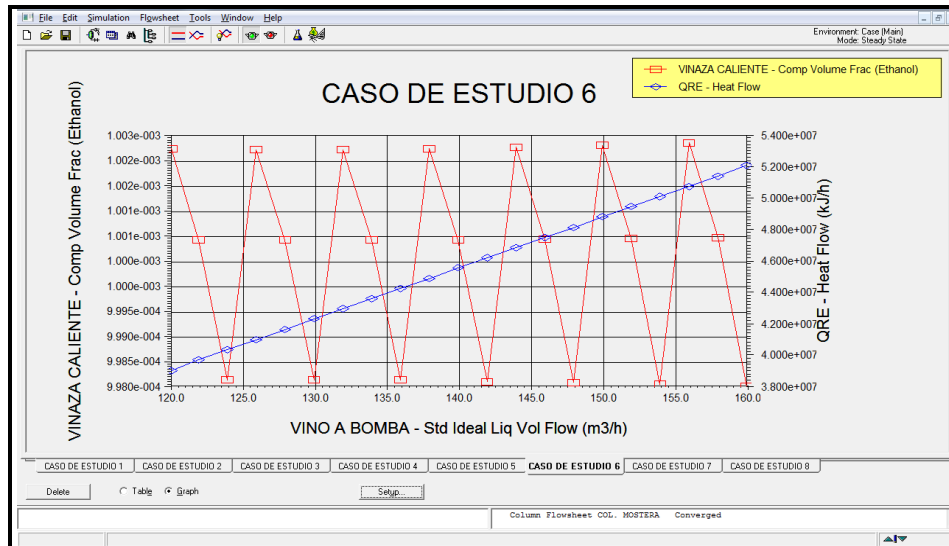


Fuente: Hysys 3.01

En la siguiente grafica se confirma la conclusión dada en el analisis anterior, puesto que para combinaciones de temperaturas entre 92 y 94 °C y presiones alrededor de 1 bar se obtienen los menores gastos energeticos, tal es el caso que para una temperatura de 93° C y una presión cercana a 1 bar se obtiene un consumo energetico de 1.0 E7 KJ/h.

3.5.6. Análisis del flujo de vino sobre la composición de la vinaza y sobre el consumo energético

Fig. 27. Caso de Estudio n° 6.

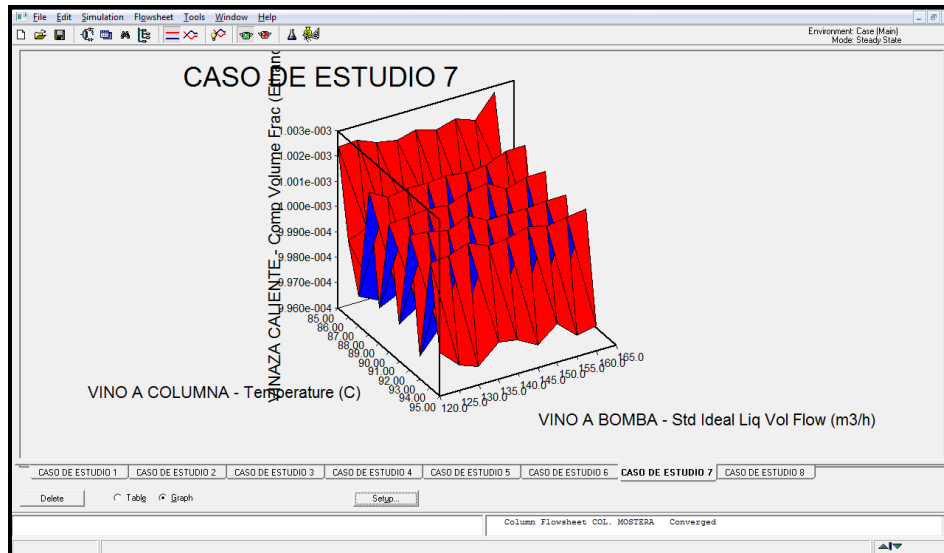


Fuente: Hysys 3.01

Tal como lo muestra la grafica se observa una dependencia lineal entre el caudal de ingreso de vino y el consumo energetico en el reboiler, de manera que a mayor caudal de ingreso de vino a la columna más es el gasto de energía; por otro lado la relación con la composición es oscilante con valores desde 9.98E-4 hasta 1.003E-3; sin embargo estas variaciones no son significativas en tanto que la variación no supera el 1%.

3.5.7. Análisis conjunto del flujo de vino y la temperatura sobre la composición de la vinaza

Fig. 28. Caso de Estudio n° 7.

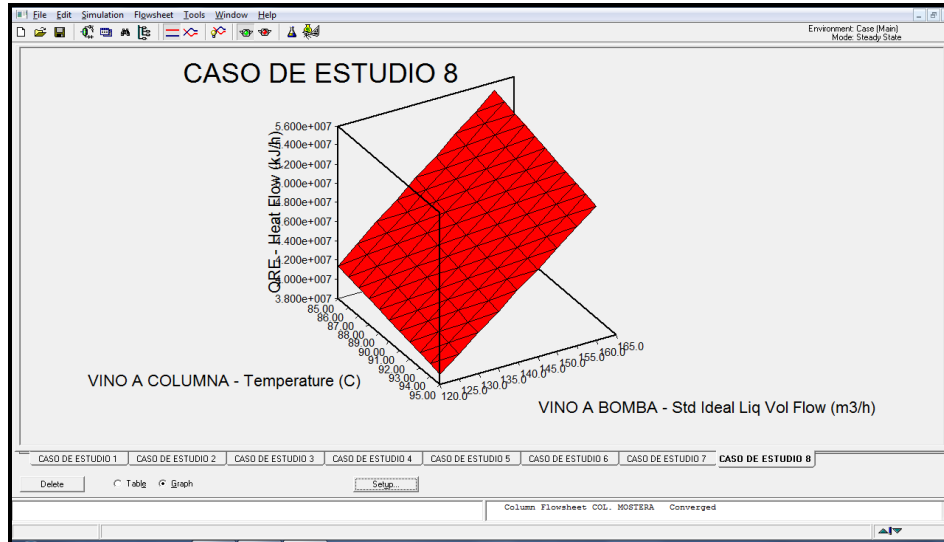


Fuente: Hysys 3.01

La siguiente grafica muestra la influencia conjunta de la temperatura y el caudal de vino, sobre la composición de la vinaza, de manera que a pesar que se observa un comportamiento irregular y las variaciones de composición de etanol en la vinaza no son significativas, se puede afirmar que los mas bajos valores de concentración se dan cuando se tiene temperaturas alrededor de 93°C y que el caudal no tiene mayor impacto sobre la composición de la vinaza; sin embargo hay que tener en cuenta las variables de diseño y la limpieza de la columna a fin de evitar inundaciones.

3.5.8 Análisis conjunto del flujo de vino y la temperatura sobre el consumo energético del reboiler.

Fig. 29. Caso de Estudio n° 8.



Fuente: Hysys 3.01

En esta grafica se observa que para combinaciones de temperaturas alrededor de 93°C y flujos alrededor de 120 m³/h, se obtienen los menores consumos energéticos en el reboiler de la columna; sin embargo el flujo de vino no se puede reducir aduciendo ahorro energético, puesto que también se reduce directamente la producción de alcohol anhidro, por ende la cantidad de vino que ingresa la columna no debe ser baja, o dicho de otra manera se debe evitar trabajar a baja carga.

3.6. CORRIDA FINAL REALIZADA CON LOS PARÁMETROS ÓPTIMOS DE OPERACIÓN

Finalmente se realiza una corrida final con los parámetros óptimos de operación obtenidos mediante el análisis de sensibilidad anterior, por otro lado los datos de las variables de diseño se mantienen igual a los iniciales.

Cuadro 6. Parámetros de entrada utilizados para la corrida final.

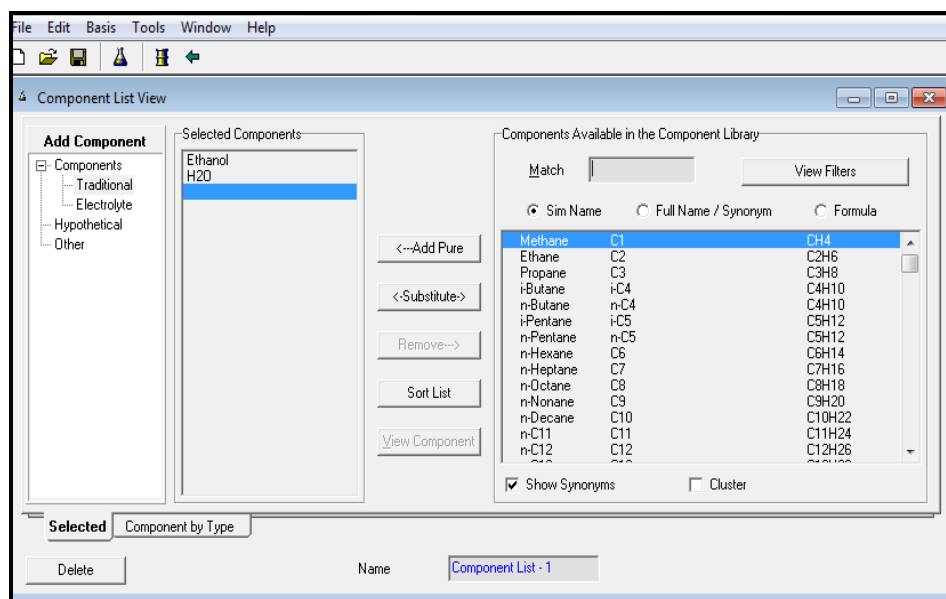
| Ítem | Variable | Unidad | Dato Promedio |
|------|------------------------------|--------|-----------------------------|
| 1 | Componentes | - | Etanol-Agua |
| 2 | Paquete termodinámico | - | NRTL |
| 3 | Temp. ingreso vino a bomba | °C | 25.0 |
| 4 | Temp. ingreso de vino a Col. | °C | 94 |
| 5 | Presión ingreso vino a bomba | bar | 1.0 |
| 6 | Presión ingreso vino a Col. | bar | 1.1 |
| 7 | Flujo de vino | m3/h | 160.6 |
| 8 | Grado de Vino | % v/v | 8.31 (0.0275 Frac. Mol-Et.) |

Fuente: Elaboración propia.

3.6.1 Datos de entrada

3.6.1.1 Ingreso de componentes y selección del paquete termodinámico

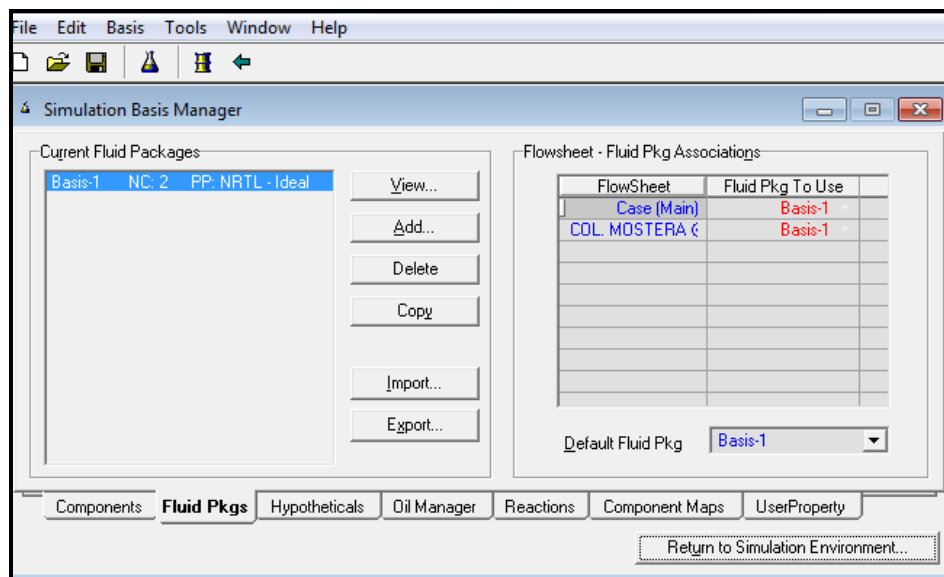
Fig. 30. Ingreso de componentes.



Fuente: Hysys 3.01

3.6.1.2. Ingreso de componentes y selección del paquete termodinámico

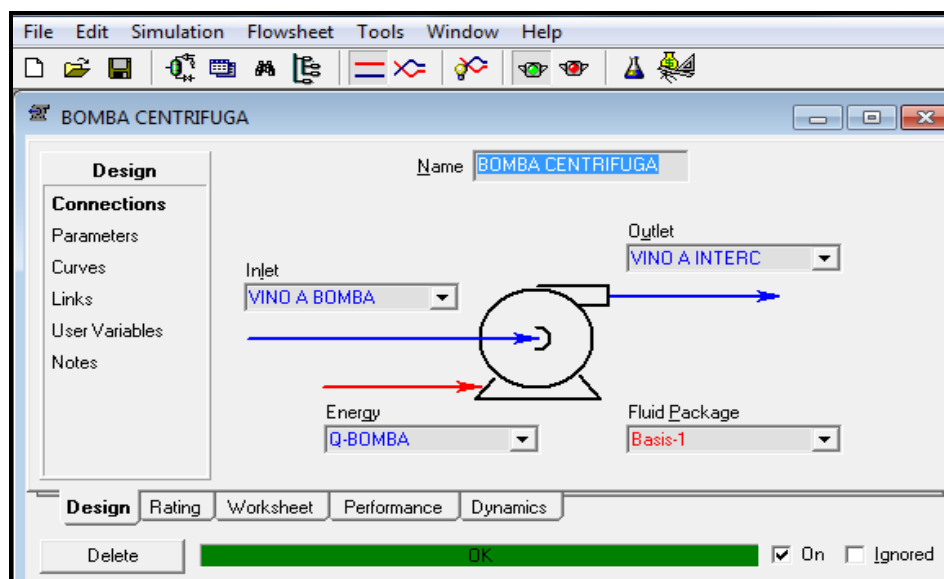
Fig. 31. Pantalla que muestra la selección del paquete termodinámico.



Fuente: Hysys 3.01

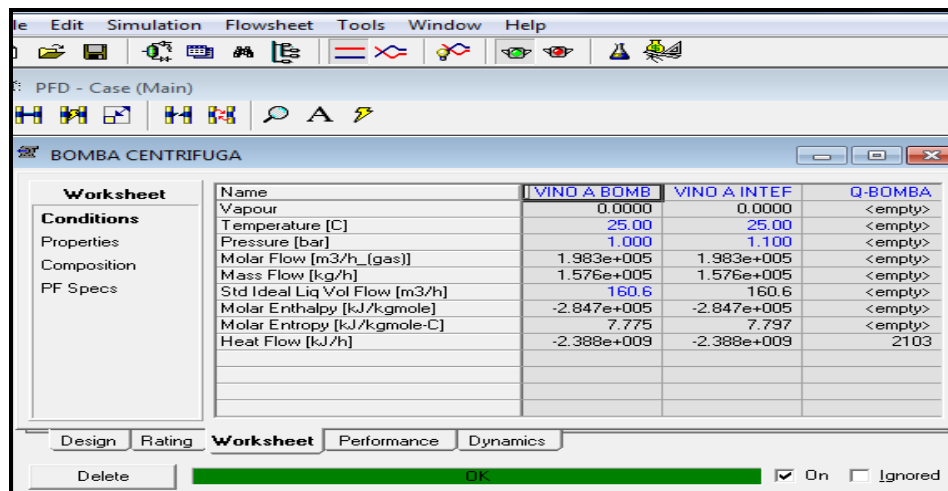
3.6.2. Ingreso de datos para la bomba

Fig. 32. Pantalla que muestra las conexiones para la bomba de vino.



Fuente: Hysys 3.01

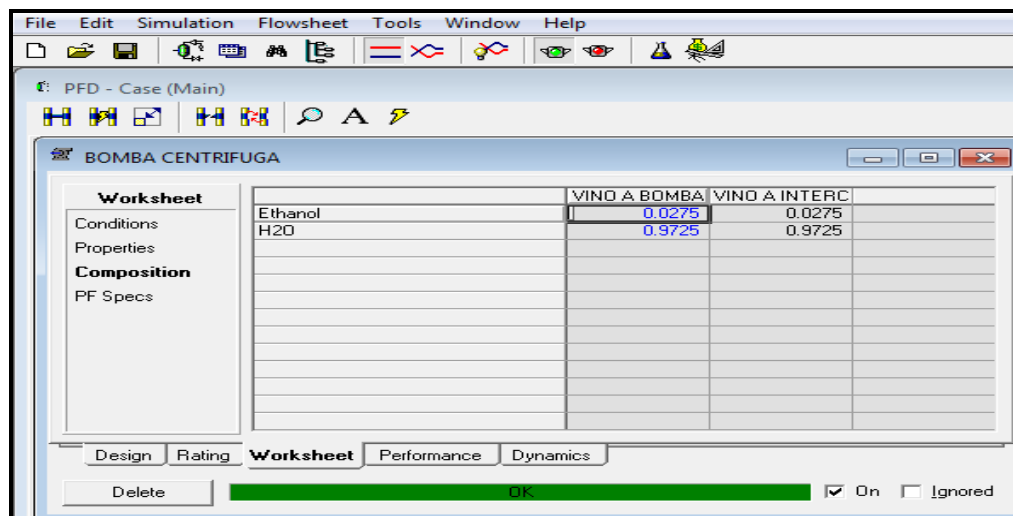
Fig. 33. Pantalla que muestra las condiciones de entrada y salida del vino.



| | VINO A BOMB | VINO A INTEF | Q-BOMBA |
|-------------------------------|-------------|--------------|---------|
| Name | | | |
| Vapour | 0.0000 | 0.0000 | <empty> |
| Temperature [C] | 25.00 | 25.00 | <empty> |
| Pressure [bar] | 1.000 | 1.100 | <empty> |
| Molar Flow [m3/h (gas)] | 1.983e+005 | 1.983e+005 | <empty> |
| Mass Flow [kg/h] | 1.576e+005 | 1.576e+005 | <empty> |
| Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h] | 160.6 | 160.6 | <empty> |
| Molar Enthalpy [kJ/kgmole] | -2.847e+005 | -2.847e+005 | <empty> |
| Molar Entropy [kJ/kgmole-C] | 7.775 | 7.797 | <empty> |
| Heat Flow [kJ/h] | -2.388e+009 | -2.388e+009 | 2103 |

Fuente: Hysys 3.01

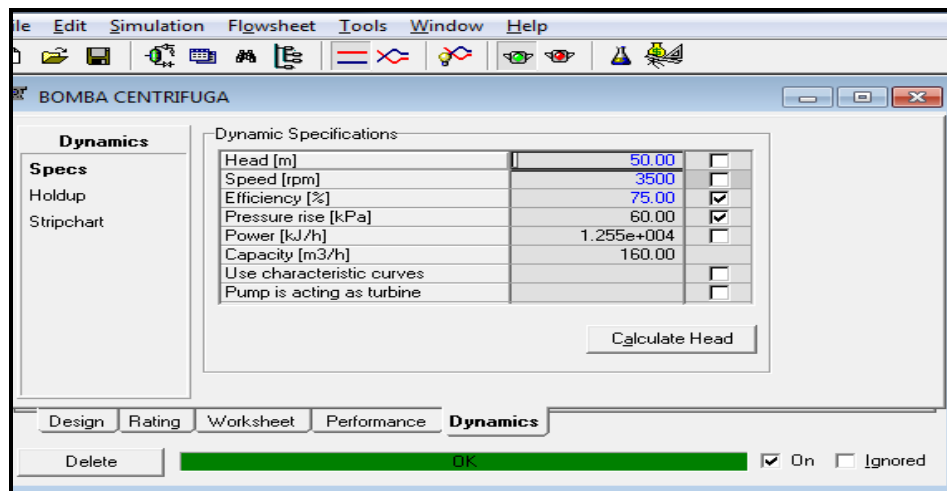
Fig. 34. Pantalla que muestra la composición de los componentes a la entrada.



| | VINO A BOMBA | VINO A INTERC |
|---------|--------------|---------------|
| Ethanol | 0.0275 | 0.0275 |
| H2O | 0.9725 | 0.9725 |
| | | |
| | | |
| | | |
| | | |
| | | |
| | | |
| | | |
| | | |

Fuente: Hysys 3.01

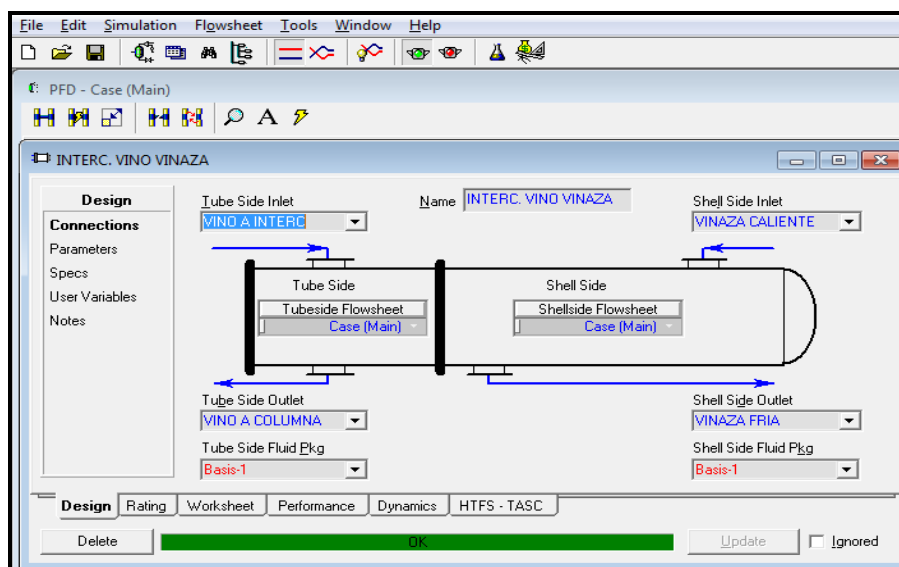
Fig. 35. Pantalla que muestra las especificaciones técnicas de diseño de la bomba.



Fuente: Hysys 3.01

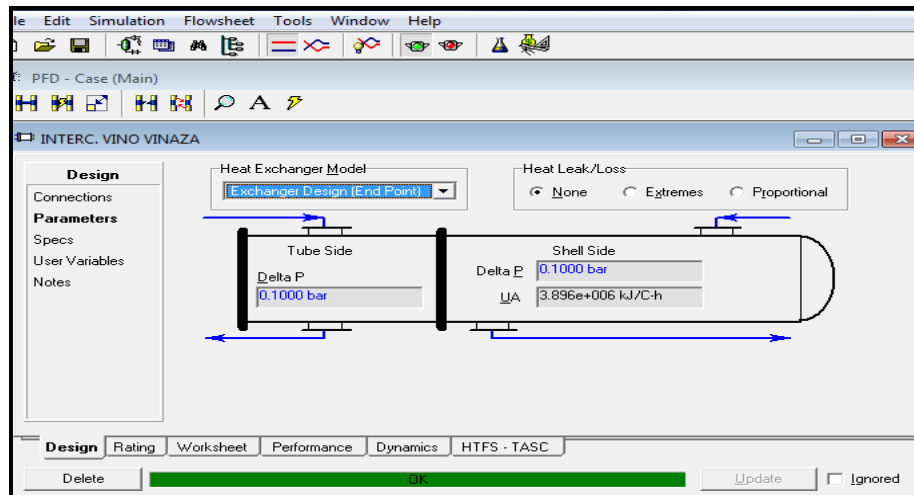
3.6.3. Ingreso de datos para el intercambiador de calor vino/vinaza

Fig. 36. Pantalla que muestra las conexiones del intercambiador.



Fuente: Hysys 3.01

Fig. 37. Pantalla que muestra el ingreso de las caídas de presión en casco y tubos.



Fuente: Hysys 3.01

Fig. 38. Pantalla que muestra las condiciones de entrada y salida del equipo.

| Name | VINO A INTER | VINO A COLU | VINAZA CALIE | VINAZA FRIA |
|-------------------------------|--------------|-------------|--------------|-------------|
| Vapour | 0.0000 | 0.0000 | 0.0000 | 0.0000 |
| Temperature [C] | 25.00 | 93.00 | 109.2 | 32.71 |
| Pressure [bar] | 1.100 | 1.000 | 1.400 | 1.300 |
| Molar Flow [m3/h, (gas)] | 1.983e+005 | 1.983e+005 | 1.817e+005 | 1.817e+005 |
| Mass Flow [kg/h] | 1.576e+005 | 1.576e+005 | 1.385e+005 | 1.385e+005 |
| Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h] | 160.6 | 160.6 | 138.8 | 138.8 |
| Molar Enthalpy [kJ/kgmole] | -2.847e+005 | -2.794e+005 | -2.785e+005 | -2.843e+005 |
| Molar Entropy [kJ/kgmole-C] | 7.797 | 24.52 | 25.46 | 8.526 |
| Heat Flow [kJ/h] | -2.388e+009 | -2.344e+009 | -2.140e+009 | -2.185e+009 |

Fuente: Hysys 3.01

Fig. 39. Pantalla el ingreso de variables de diseño del intercambiador.

INTERC. VINO VINAZA

Rating

Sizing

Parameters

Sizing Data

☒ Overall ☐ Shell ☐ Tube

☐ Accept any input data

Configuration

| | |
|--------------------------------|------------|
| Number of Shell Passes | 1 |
| Number of Shells in Series | 2 |
| Number of Shells in Parallel | 1 |
| Tube Passes per Shell | 2 |
| Exchanger Orientation | Horizontal |
| First Tube Pass Flow Direction | Counter |
| Elevation (Base) | 0.0000 |

TEMA Type: **A** **E** **L**

Calculated Information

| | |
|--|------------|
| Shell HT Coeff [kJ/h-m ² -C] | <empty> |
| Tube HT Coeff [kJ/h-m ² -C] | <empty> |
| Overall U [kJ/h-m ² -C] | 3320 |
| Overall UA [kJ/C-h] | 3.896e+006 |
| Shell DP [bar] | 0.1000 |
| Tube DP [bar] | 0.1000 |
| Heat Trans. Area per Shell [m ²] | 586.8 |
| Tube Volume per Shell [m ³] | 3.318 |
| Shell Volume per Shell [m ³] | 12.80 |

Design **Rating** Worksheet Performance Dynamics HTFS - TASC

Delete **OK** Update ☐ Ignored

Fuente: Hysys 3.01

Fig. 40. Pantalla que muestra las variables de diseño del intercambiador.

INTERC. VINO VINAZA

Rating

Sizing

Parameters

Sizing Data

☐ Overall ☒ Shell ☐ Tube

☐ Accept any input data

Shell and Tube Bundle Data

| | |
|--|-------------------------|
| Shell Diameter [mm] | 1896.60 |
| Number of Tubes per Shell | 1100 |
| Tube Pitch [mm] | 50.00 |
| Tube Layout Angle | Triangular (30 degrees) |
| Shell Fouling [C-h-m ² /kJ] | 0.000000 |

Shell Baffles

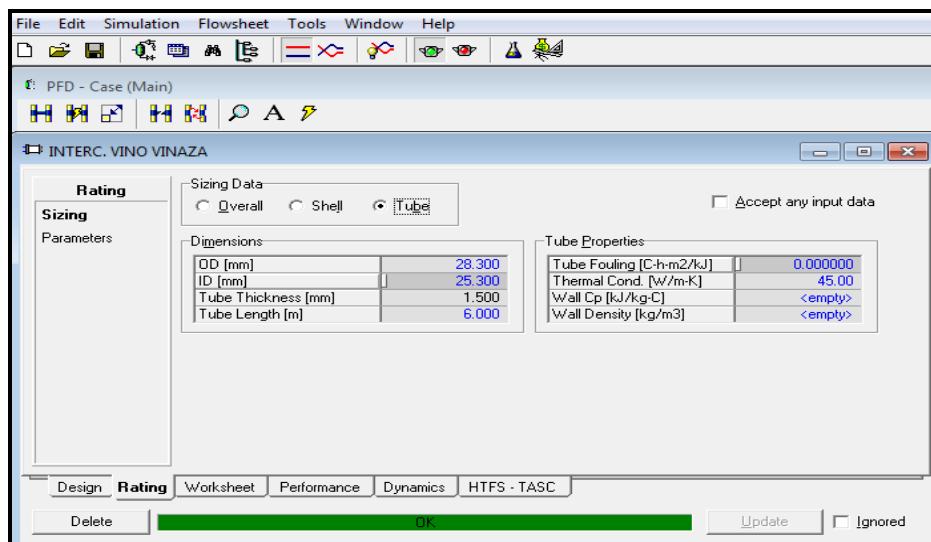
| | |
|--------------------------|------------|
| Shell Baffle Type | Single |
| Shell Baffle Orientation | Horizontal |
| Baffle Cut [%Area] [%] | 20.00 |
| Baffle Spacing [mm] | 800.00 |

Design **Rating** Worksheet Performance Dynamics HTFS - TASC

Delete **OK** Update ☐ Ignored

Fuente: Hysys 3.01

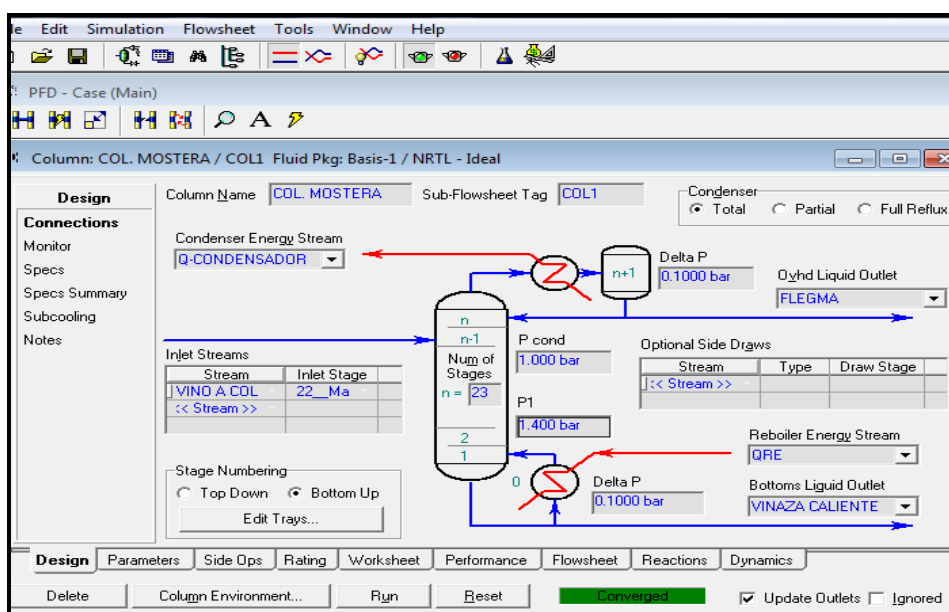
Fig. 41. Pantalla que muestra las variables de diseño del intercambiador.



Fuente: Hysys 3.01

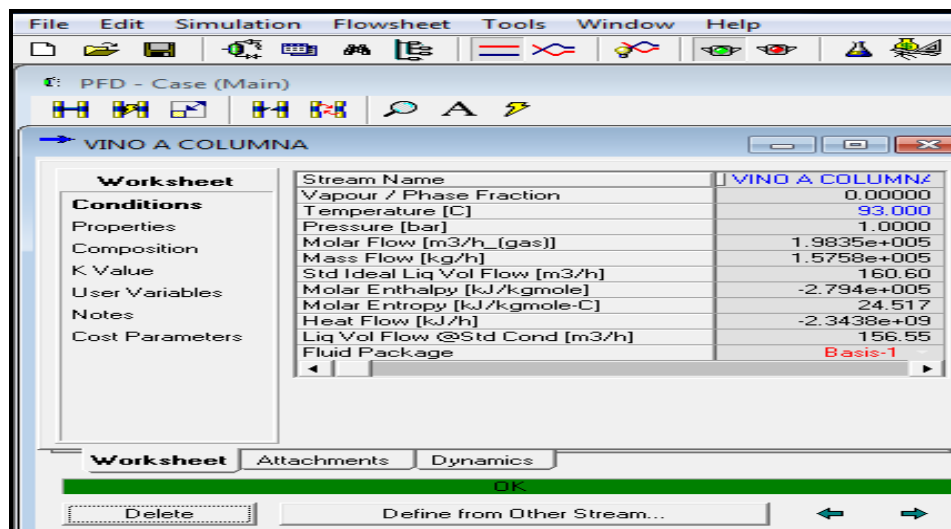
3.6.4. Ingreso de datos para la columna mostera

Fig. 42. Pantalla que muestra las conexiones y datos para la columna mostera.



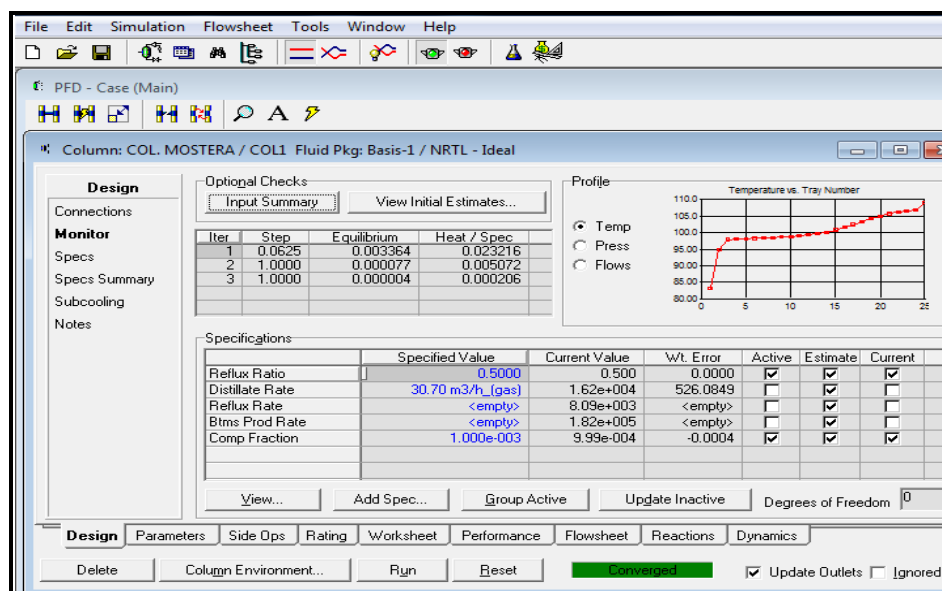
Fuente: Hysys 3.01

Fig. 43. Pantalla que muestra las condiciones de ingreso del vino a la columna.



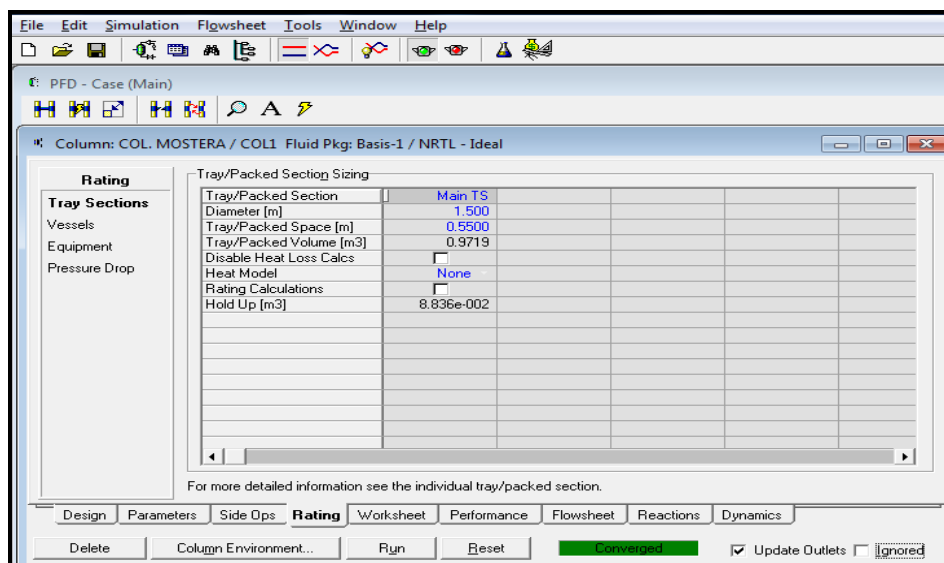
Fuente: Hysys 3.01

Fig. 44. Pantalla que muestra el ingreso de la relación de reflujo, flujo de destilado y fracción volumen de etanol en la vinaza.



Fuente: Hysys 3.01

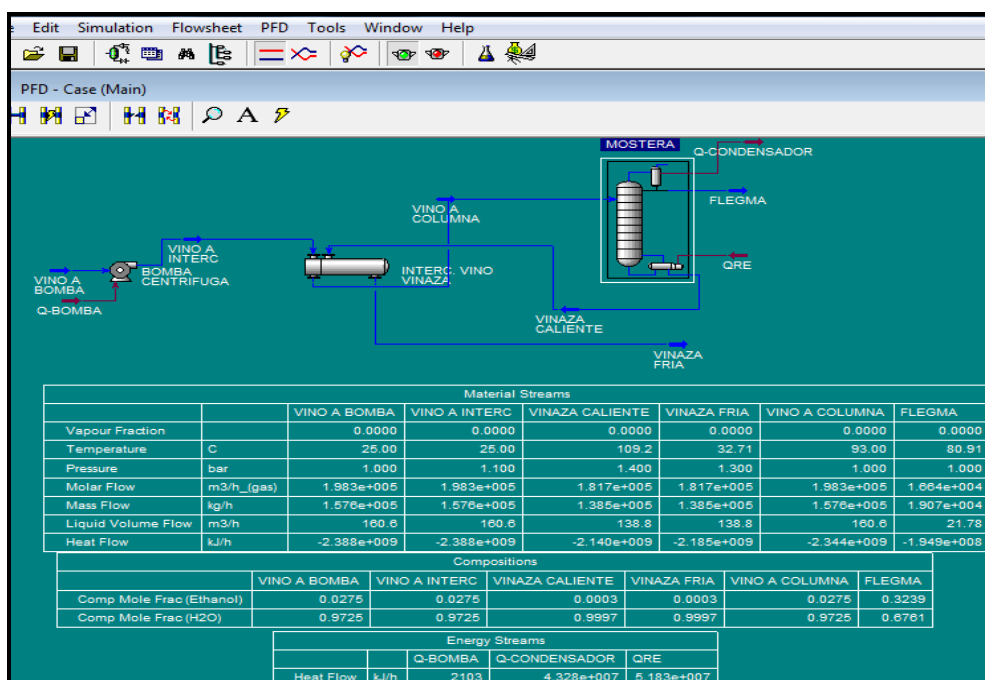
Fig. 45. Pantalla que muestra el ingreso de variables de diseño de la columna mostera.



Fuente: Hysys 3.01

3.6.5. Corrida Final realizada con los parámetros óptimos.

Fig. 46. Pantalla que muestra la corrida final de la unidad de operación-Col. mostera.



Fuente: Hysys 3.01

La información a detalle concerniente a los reportes detallados de la simulación se muestra en el anexo N° 2.

CONCLUSIONES

Este trabajo de optimización a partir de la simulación del proceso en cuestión, permitió la determinación de los parámetros de operación más favorables para la operación de la columna mostera del sistema de destilación Maple Etanol, bajo las restricciones y asunciones impuestas.

1. La similitud entre los datos reales y los obtenidos mediante la simulación de la operación de la columna mostera, sirven para validar el modelo simulado, demostrando así que la simulación de procesos es una técnica confiable para el análisis de problemas de operación en plantas industriales.
2. La diferencia notable entre la concentración de etanol en la vinaza obtenida mediante simulación y el dato real, brindado por Control de calidad, demuestra que éste parámetro se está viendo afectado por otra variable que no corresponde a las de operación y posiblemente puede deberse a problemas de fallas mecánicas tales como perdidas de material debido a algún tipo de fuga.
3. De todas las variables estudiadas, la temperatura es la más sensible en relación al consumo energético, puesto que pequeñas variaciones producen cambios significativos en éste; sin embargo la influencia es nula para la concentración de etanol en la vinaza.
4. Las variaciones de presión en la línea de salida de la bomba de vino no tienen impacto sobre la composición de la vinaza, pero influyen notablemente sobre para el gasto energético.
5. Las variaciones de presión a la salida de bomba de vino, influye más significativamente sobre el consumo energético del reboiler, que sobre el de la bomba, para el rango de 0.95 a 1.2 bar.
6. Los análisis de sensibilidad, realizados de forma conjunta con dos variables independientes sobre una dependiente, ratifican los resultados obtenidos en los que se evalúa el efecto de una variable independiente sobre otra independiente.

7. La variable flujo de vino no tiene mayor incidencia sobre la composición de la vinaza, sin embargo es altamente influyente sobre el consumo energético en el reboiler; por otro lado cabe resaltar que no es conveniente sobrepasar los flujo máximos de diseño que bordean los 180 m³/h ya que se puede verificar inundaciones en la columna mostera, lo cual perjudica la operación de destilación.

RECOMENDACIONES

1. Referente a la simulación, se debe tener en cuenta que la elección del paquete termodinámico es crucial para la simulación en sí del modelo a simular, por lo que se debe llevar a cabo mediante un método de selección adecuada y además compararlo con algún referente bibliográfico.
2. Para acercarnos más a la realidad en el modelo simulado se deben contemplar todos los componentes presentes en la vinaza, para ello se puede utilizar la técnica conocida como la espectrometría de masas.
3. Se debe tener en cuenta que las suposiciones escogidas tal como las caídas de presión deben tener un precedente bibliográfico fiable.
4. Referente al proceso productivo, en el aspecto de muestreo se deben considerar los análisis tipo composito en lugar de los puntuales, a fin de obtener datos más representativos.
5. Se debe analizar e investigar a fondo las pérdidas de alcohol en la vinaza, pero ya no desde el punto de vista de parámetros de operación sino más bien desde un punto mecánico, o de limpieza.

BIBLIOGRAFÍA

1. Blanco, A. (1997). *“Análisis del equilibrio liquido-vapor a 141,3 kpa de mezclas binarias que contienen metanol con n-alcanos (C5, C6) y con esterres alquílicos”*, Escuela superior de Ingenieros Industriales, Universidad de las Palmas de Gran Canaria.
2. Black, C. (1980). *“Distillation modeling of ethanol recovery and dehydration processes for ethanol and gasohol”*. Chemical Engineering Progress. Vol. 76. p. 78-85.
3. Cidre, E., et al. (2009). *“Metodología para la selección de Correlaciones Termodinámicas para el Equilibrio de Fases Aplicada al simulador Hysys”*, Dpto. de Ingeniería química, Facultad de Ingeniería, U.B.A, Argentina.
4. Casanova, J. (2002). *“Utilización de Combustibles Alternativos en Motores Térmicos”*. Módulo 1. Universidad Nacional de Colombia: Medellín.
5. Cerpa, G. (2005). *“Producción de etanol anhidro como aditivo para gasolina a partir de la caña de azúcar de la región del Río Huallaga”*, Facultad de Ciencias, Dpto. de Ingeniería Química y Tecnología del Medio Ambiente, Universidad de Valladolid.
6. Cardona A., y Sanchez V. (2005). *“Selección de tecnologías apropiadas para la producción de etanol carburante”*. Ingeniería de Recursos Naturales y del Ambiente, 1(2), 48-55.
7. Carlson. (1996). *“Don't Gamble with Physical Properties for Simulations”*. Chemical Engineering Progress. p. 34-46.
8. De Juana, J., et al. (2007). *“Energías Renovables para el Desarrollo”*, primera edición, Ed. Thomson Editores, España.
9. Gil, I. et al. (2006). *“Diseño y operación de una columna de destilación extractiva”*, Departamento de Ingeniería Química, Universidad Nacional de Colombia.
10. Lei, Z., Wang, H., Zhou, R. and Duan, Z., (2002). *“Influence of salt added to solvent on extractive distillation”*. 63-1762-1786.
11. Meirelles, A., et al (1992). *“Ethanol Dehydration by Extractive Distillation”*. Journal Chemistry and Tech. Biotechnology. Vol 53, p. 181-188.

12. Montoya, M., et al. (2005). ***“Esquema tecnológico integral de la producción de bioetanol carburante”***. Trabajo de grado Ingeniería Química. Universidad Nacional de Colombia: Manizales. 115 p.
13. Martínez, V., et al (2000), ***“Simulación de Procesos en Ingeniería Química”***, Editorial Plaza y Valdez, Mexico D.F, 1° Edición, ISBN 968-856-755-8.
14. Naranjo h., (1993). ***“Proyecto de Factibilidad Agroeconómica para la Producción de Caña con Destino a la Industria Licorera de Caldas”***. Gobernación de Caldas, Manizales.
15. Olujic, Z., Futamura K. (2006). ***“Three-component distillation using structured packings: Performance evaluation and model validation chemical engineering”***, 61-1760-1766.
16. Pinto, R., et al. (2000). ***“Saline extractive distillation process for ethanol purification”***. Computers & Chemical Engineering. Vol. 24 p. 1689-1694.
17. Perry, J., (1966). ***“Manual del Ingeniero Químico”***, tercera edición, Ed. Utehaunion Tipográfica Editorial Hispano-Americana, México.
18. Scenna, N., et al. (1999). “Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos, ISBN: 950-42-0022-2.
19. Uyazán, A., et al. (2006). ***“Producción de alcohol carburante por destilación extractiva: Simulación del proceso con glicerol”***, Ingeniería e Investigación, abril, año/vol. 26.
20. Vásquez, C., et al. (2007). ***“Producción de Etanol Absoluto por Destilación Extractiva combinada con Efecto Salino”***., Nro 151, pp. 53-59. Medellín.
21. Wheals, a., basso l., Alves d., Amorim, H., (1999). ***“Fuel ethanol after 25 years”***. TIBTECH, vol. 17, no. 12, pp. 482-487.
22. Wolf Maciel, M.R and Brito R.P.(1995). ***“Evaluation of the Dynamic behaviour on an Extractive Distillation Column for Dehydration of Aqueous Ethanol Mixtures”***. Computes Chemical Engineering. Vol. 14; 405-408.

ANEXOS

ANEXO 1- DATOS REFERIDOS A PARÁMETROS DE OPERACIÓN Y A VARIABLES DE DISEÑO.

Tabla A.1 Parámetros de Operación del vino

| Fecha | VINO | | |
|---------------|----------------|--------------|------|
| | T ingreso (°C) | flujo (m3/h) | °GL |
| 01/09/2014 | 90.1 | 150.250 | 8.5 |
| 02/09/2014 | 90.2 | 150.706 | 8.6 |
| 03/09/2014 | 89.9 | 163.350 | 8.8 |
| 04/09/2014 | 90.7 | 155.270 | 8.8 |
| 05/09/2014 | 91.9 | 168.332 | 8.0 |
| 06/09/2014 | 90.1 | 170.245 | 7.9 |
| 07/09/2014 | 89.9 | 151.990 | 8.5 |
| 08/09/2014 | 90.1 | 155.876 | 8.7 |
| 09/09/2014 | 90.2 | 158.900 | 8.4 |
| 10/09/2014 | 92.9 | 161.567 | 8.1 |
| 11/09/2014 | 90.2 | 166.211 | 8.2 |
| 12/09/2014 | 89.5 | 165.778 | 7.9 |
| 13/09/2014 | 91.8 | 169.987 | 8.4 |
| 14/09/2014 | 90.1 | 155.678 | 8.0 |
| 15/09/2014 | 89.9 | 153.223 | 8.0 |
| 16/09/2014 | 90.3 | 163.345 | 8.6 |
| 17/09/2014 | 90.7 | 154.997 | 9.1 |
| 18/09/2014 | 90.3 | 158.789 | 7.6 |
| 19/09/2014 | 89.9 | 166.980 | 8.0 |
| 20/09/2014 | 89.7 | 170.001 | 8.1 |
| DAT. PROM. | 90.42 | 160.57 | 8.31 |

Fuente: Departamento de Control de Calidad –Maple Etanol.

Tabla A.2 Parámetros de Operación de la Flegma.

| Fecha | FLEGMA | | |
|---------------|-----------|-----------------|-------|
| | Temp.(°C) | flujo (m3/h) | °GL |
| 01/09/2014 | 79.1 | 19.980 | 41.1 |
| 02/09/2014 | 79.2 | 19.320 | 41.34 |
| 03/09/2014 | 80.3 | 20.510 | 43.7 |
| 04/09/2014 | 78.1 | 21.450 | 44.1 |
| 05/09/2014 | 77.2 | 22.560 | 44.7 |
| 06/09/2014 | 80.5 | 24.890 | 42.5 |
| 07/09/2014 | 79.2 | 23.560 | 43.3 |
| 08/09/2014 | 79.1 | 23.540 | 40.9 |
| 09/09/2014 | 79.1 | 20.000 | 45.23 |
| 10/09/2014 | 80.5 | 20.010 | 43.2 |
| 11/09/2014 | 77.5 | 21.110 | 41.2 |
| 12/09/2014 | 78.8 | 29.084 | 43.67 |
| 13/09/2014 | 77.3 | 23.980 | 42.56 |
| 14/09/2014 | 78.8 | 25.120 | 41.11 |
| 15/09/2014 | 79.4 | 24.980 | 43.78 |
| 16/09/2014 | 79.1 | 23.450 | 45.12 |
| 17/09/2014 | 80.1 | 21.230 | 44.12 |
| 18/09/2014 | 80.9 | 22.220 | 43.12 |
| 19/09/2014 | 79.8 | 21.990 | 40.29 |
| 20/09/2014 | 79.1 | 22.130 | 42.76 |
| DAT. PROM. | 79.16 | 22.56 | 42.89 |

Fuente: Departamento de Control de Calidad –Maple Etanol.

Tabla A.3 Parámetros de Operación de la vinaza.

| Fecha | VINAZA | | |
|---------------|-----------|--------------|------|
| | Temp.(°C) | flujo (m3/h) | °GL |
| 01/09/2014 | 110.2 | 136.72 | 0.12 |
| 02/09/2014 | 110.5 | 135.89 | 0.13 |
| 03/09/2014 | 110.9 | 138.91 | 0.12 |
| 04/09/2014 | 111.5 | 131.67 | 0.10 |
| 05/09/2014 | 108.5 | 129.23 | 0.13 |
| 06/09/2014 | 108.9 | 138.33 | 0.15 |
| 07/09/2014 | 109.3 | 136.94 | 0.15 |
| 08/09/2014 | 110.2 | 133.45 | 0.14 |
| 09/09/2014 | 108.5 | 130.32 | 0.12 |
| 10/09/2014 | 108.9 | 131.25 | 0.13 |
| 11/09/2014 | 107.6 | 134.33 | 0.11 |
| 12/09/2014 | 108.9 | 132.24 | 0.12 |
| 13/09/2014 | 110.1 | 130.78 | 0.13 |
| 14/09/2014 | 109.4 | 134.56 | 0.14 |
| 15/09/2014 | 109.3 | 135.11 | 0.13 |
| 16/09/2014 | 109.4 | 132.55 | 0.14 |
| 17/09/2014 | 110.5 | 129.89 | 0.13 |
| 18/09/2014 | 109.8 | 128.45 | 0.12 |
| 19/09/2014 | 108.2 | 135.64 | 0.11 |
| 20/09/2014 | 107.1 | 136.32 | 0.13 |
| DAT. PROM. | 109.39 | 133.63 | 0.13 |

Fuente: Departamento de Control de Calidad –Maple Etanol.

Cuadro A.1 Parámetros de Operación para la simulación.

| Ítem | Variable | Unidad | Dato Promedio |
|------|------------------------------|--------|-----------------------------|
| 1 | Componentes | - | Etanol-Agua |
| 2 | Paquete termodinámico | - | NRTL |
| 3 | Temp. ingreso vino a bomba | °C | 25.0 |
| 4 | Temp. ingreso de vino a Col. | °C | 90.7 |
| 5 | Presión ingreso vino a bomba | bar | 1.0 |
| 6 | Presión ingreso vino a Col. | bar | 1.4 |
| 7 | Flujo de vino | m3/h | 160.6 |
| 8 | Grado de Vino | %v/v | 8.31 (0.0275 Frac. Mol-Et.) |

Fuente: Departamento de Producción-Maple Etanol.

Cuadro A.2. Variables de diseño para la bomba.

| Ítem | Especificación | Unidad | Valor |
|------|------------------|--------|-----------------|
| 1 | Tipo | - | Centrifuga |
| 2 | Tipo de impulsor | - | Semi abierto |
| 3 | Material | - | Acero -inox-304 |
| 4 | Cabeza total | m | 50 |
| 5 | Velocidad | rpm | 3500 |
| 6 | Eficiencia | % | 75 |

Fuente: Departamento de Producción-Maple Etanol.

Cuadro A.3. Variables de diseño para el intercambiador de calor.

| Ítem | Especificación | Unidad | Valor |
|------|------------------------|--------|---------------|
| 1 | Tipo | - | Casco y Tubos |
| 2 | Caída de presión tubos | bar | 0.1 |
| 3 | Caída de presión casco | bar | 0.1 |
| 4 | N° pasos casco | u. | 2 |
| 5 | N° pasos tubo | u. | 2 |
| 6 | Diámetro casco | mm. | 1896 |
| 7 | N° Tubos | u. | 1100 |
| 8 | Arreglo de tubos | - | Triangular |
| 9 | Diámetro interior | mm. | 25.3 |
| 10 | Diámetro exterior | mm. | 28.3 |
| 11 | Longitud de tubo | m. | 6 |
| 12 | Conductividad térmica | W/m.K | 45 |

Fuente: Departamento de Producción-Maple Etanol.

Cuadro A.4. Variables de diseño para la columna mostera.

| Ítem | Especificación | Unidad | Valor |
|------|---------------------------|--------|------------|
| 1 | Tipo | - | Platos |
| 2 | Forma | - | Cilíndrica |
| 3 | Diámetro | m. | 1.5 |
| 4 | Altura de columna | m. | 14 |
| 5 | N° Platos | u. | 23.0 |
| 6 | Palto de alimentación | - | 22.0 |
| 7 | Espaciado entre platos | m | 0.55 |
| 8 | Tipo de condensador | - | Total |
| 9 | Caída de presión cond. | bar | 0.1 |
| 10 | Caída de presión reboiler | bar | 0.1 |
| 11 | Relación de reflujo | - | 0.5 |

Fuente: Departamento de Producción-Maple Etanol.

ANEXO 2- GLOSARIO DE TERMINOS

A) Etanol Anhidro:

Tipo de alcohol etílico que se caracteriza por tener como máximo 0.5% de humedad y por ser compatible con las gasolinas con las cuales se puede mezclar para producir un combustible oxigenado para uso motor.

B) Flegma:

Producto alcohólico de bajo concentración en etanol, obtenido en los procesos de destilación de mostos.

C) Columna Mostera:

Columna de destilación donde se despoja todo el alcohol contenido en el vino, el cual es alimentado a ésta; trabaja como una inyección de vapor saturado que ingresa por la parte baja de la columna.

D) Vinaza:

Subproducto de la producción de etanol anhidro, obtenido por la parte baja de la columna mostera y cuya composición es básicamente agua, sólidos suspendidos y trazas de alcohol.

e) Reboiler:

Palabra de origen norteamericana que hace referencia a un rehervic calderín, el cual no es más que un intercambiador de calor

f) Plato de alimentación:

Aquel plato de la columna de destilación por donde ingresa la alimentación.

g) Azeótropo:

Mezcla líquida cuya separación por métodos convencionales de separación, como la destilación es imposible.

ANEXO 3-REPORTE DETALLADO DE LA SIMULACIÓN


| Pump: BOMBA CENTRIFUGA | | | |
|------------------------------|---------------------|---------------------------|---|
| CONNECTIONS | | | |
| Inlet Stream | | | |
| Stream Name | From Unit Operation | | |
| VINO A BOMBA | | | |
| Outlet Stream | | | |
| Stream Name | To Unit Operation | | |
| VINO A INTERC | Heat Exchanger | INTERC: VINO VINAZA | |
| Energy Stream | | | |
| Stream Name | From Unit Operation | | |
| Q-BOMBA | | | |
| PARAMETERS | | | |
| Adiabatic Efficiency (%) | 75.00 * | Delta P: | 0.1000 bar Energy: 502.7 kcal/h |
| CURVES | | | |
| Delta P: | 0.1000 bar | Energy: | 502.7 kcal/h |
| Coefficient A: | 0.0000 * | Coefficient B: | 0.0000 * |
| Coefficient C: | 0.0000 * | Coefficient D: | 0.0000 * |
| Parameter Preferences | Units for Delta P: | m | Flow Basis: ActVolFlow Units for Flow: m3/h |
| User Variables | | | |
| Hyprotech Ltd. | | HYSYS v3.0.1 (Build 4602) | |
| | | Page 1 of 20 | |

| Pump: BOMBA CENTRIFUGA (continued) | | | |
|------------------------------------|--------|----------------------------|--------|
| RATING | | | |
| Characteristic Curves | | | |
| Speed: | | | |
| Flow | Head | Efficiency (%) | |
| NPSH | | | |
| NPSH Required | --- | NPSH Available | --- |
| NPSH Curves | | Enable NPSH Curves: | No |
| Inertia | | | |
| Rotational inertia (kg-m2) | 0.5000 | Radius of gyration (m) | 0.1000 |
| Mass (kg) | 50.00 | Friction loss factor (rpm) | 6.000 |
| PROPERTIES | | | |
| | | | |
| | | | |
| | | | |
| Hyprotech Ltd. | | HYSYS v3.0.1 (Build 4602) | |
| | | Page 2 of 20 | |

| Pump: BOMBA CENTRIFUGA (continued) | | | | | |
|------------------------------------|---------------|---------------------------|-------------|---------------|-------------|
| | | VINO A BOMBA | | VINO A INTERC | |
| Vapour Fraction | | | 0.0000 | | 0.0000 |
| Temperature | (C) | | 25.00 * | | 25.00 * |
| Pressure | (bar) | | 1.000 * | | 1.100 * |
| Enthalpy | (kcal/kgmole) | | -6.805e+004 | | -6.805e+004 |
| Molar Flow | (kgmole/h) | | 8389 | | 8389 |
| Mass Flow | (kg/h) | | 1.576e+005 | | 1.576e+005 |
| Std Ideal Liq Vol Flow | (m3/h) | | 160.6 * | | 160.6 |
| Heat Flow | (kcal/h) | | -5.708e+008 | | -5.708e+008 |
| VINO A BOMBA | | | | | |
| | Overall | Aqueous Phase | | | |
| Vapour/Phase Fraction | 0.0000 | 1.0000 | | | |
| Temperature: | 25.00 * | 25.00 | | | |
| Pressure: | 1.000 * | 1.000 | | | |
| Molar Flow | 8389 | 8389 | | | |
| Mass Flow | 1.576e+005 | 1.576e+005 | | | |
| Std Ideal Liq Vol Flow | 160.6 * | 160.6 | | | |
| Molar Enthalpy | -6.805e+004 | -6.805e+004 | | | |
| Mass Enthalpy | -3622 | -3622 | | | |
| Molar Entropy | 7.775 | 7.775 | | | |
| Mass Entropy | 0.4139 | 0.4139 | | | |
| Heat Flow | -5.708e+008 | -5.708e+008 | | | |
| Molar Density | 53.18 | 53.18 | | | |
| Hyprotech Ltd. | | HYSYS v3.0.1 (Build 4602) | | Page 3 of 20 | |

| Pump: BOMBA CENTRIFUGA (continued) | | | | | |
|------------------------------------|-------------|---------------------------|--|--------------|--|
| VINO A BOMBA | | | | | |
| | Overall | Aqueous Phase | | | |
| Mass Density | 999.0 | 999.0 | | | |
| Std Ideal Liq Mass Density | 981.2 | 981.2 | | | |
| Liq Mass Density @Std Cond | 1007 | 1007 | | | |
| Molar Heat Capacity | 77.80 | 77.80 | | | |
| Mass Heat Capacity | 4.141 | 4.141 | | | |
| Thermal Conductivity | 0.5933 | 0.5933 | | | |
| Viscosity | 0.9305 | 0.9305 | | | |
| Surface Tension | 70.73 | 70.73 | | | |
| Molecular Weight | 18.79 | 18.79 | | | |
| Z Factor | 7.586e-004 | 7.586e-004 | | | |
| VINO A INTERC | | | | | |
| | Overall | Aqueous Phase | | | |
| Vapour/Phase Fraction | 0.0000 | 1.0000 | | | |
| Temperature: | 25.00 * | 25.00 | | | |
| Pressure: | 1.100 * | 1.100 | | | |
| Molar Flow | 8389 | 8389 | | | |
| Mass Flow | 1.576e+005 | 1.576e+005 | | | |
| Std Ideal Liq Vol Flow | 160.6 | 160.6 | | | |
| Molar Enthalpy | -6.805e+004 | -6.805e+004 | | | |
| Mass Enthalpy | -3622 | -3622 | | | |
| Hyprotech Ltd. | | HYSYS v3.0.1 (Build 4602) | | Page 4 of 20 | |

| Pump: BOMBA CENTRIFUGA (continued) | | | | | |
|------------------------------------|-------------|---------------------------------------|--|---------------|--|
| VINO A INTERC | | | | | |
| | Overall | Aqueous Phase | | | |
| Molar Entropy | 7.797 | 7.797 | | | |
| Mass Entropy | 0.4150 | 0.4150 | | | |
| Heat Flow | -5.708e+008 | -5.708e+008 | | | |
| Molar Density | 53.18 | 53.18 | | | |
| Mass Density | 999.0 | 999.0 | | | |
| Std Ideal Liq Mass Density | 981.2 | 981.2 | | | |
| Liq Mass Density @Std Cond | 1007 | 1007 | | | |
| Molar Heat Capacity | 77.79 | 77.79 | | | |
| Mass Heat Capacity | 4.141 | 4.141 | | | |
| Thermal Conductivity | 0.5933 | 0.5933 | | | |
| Viscosity | 0.9305 | 0.9305 | | | |
| Surface Tension | 70.73 | 70.73 | | | |
| Molecular Weight | 18.79 | 18.79 | | | |
| Z Factor | 8.344e-004 | 8.344e-004 | | | |
| PERFORMANCE | | | | | |
| Results | | | | | |
| Total Head | --- | Velocity Head | | -1.641e-004 m | |
| Pressure Head | 1.021 m | Delta P excluding Static Head Results | | --- | |
| DYNAMICS | | | | | |
| Hyprotech Ltd. | | HYSYS v3.0.1 (Build 4602) | | Page 5 of 20 | |

| | | | | | |
|---|------------------|---|-----------------------------|--------------|------------------------|
|  TEAM LND Calgary, Alberta CANADA | | Case Name: C:\Program Files\Hyprotech\HYSYS 3.0.1\Cases\CORRIDA 20-05-15.hsc Unit Set: EuroSI Date/Time: Fri Dec 19 01:37:34 2008 | | | |
| Pump: BOMBA CENTRIFUGA (continued) | | | | | |
| DYNAMICS | | | | | |
| Dynamic Specifications | | | | | |
| Duty (m) | --- | Not Active | Power (kcal/h) | 502.7 | Not Active |
| Adiabatic Efficiency (rpm) | --- | Not Active | Capacity (m3/h) | 160.6 | |
| Polytropic Efficiency (%) | 75.00 * | Active | Use Characteristic Curves | | Not Active |
| Pressure Increase (bar) | 0.1000 | Active | Pump is Acting as a Turbine | | Not Active |
| NOTES | | | | | |
| Heat Exchanger: INTERC. VINO VINAZA | | | | | |
| CONNECTIONS | | | | | |
| Tube Side | | | Shell Side | | |
| Inlet | | Outlet | Inlet | | Outlet |
| Name | VINO A INTERC | Name | VINO A COLUMNA | Name | VINAZA CALIENTE |
| From Op. | BOMBA CENTRIFUGA | To Op. | Distillador L. MOSTERA | From Op. | Distillador L. MOSTERA |
| Temp | 25.00 C * | Temp | 93.00 C * | Temp | 109.23 C |
| PARAMETERS | | | | | |
| Hyprotech Ltd. | | HYSYS v3.0.1 (Build 4602) | | Page 6 of 20 | |

| | | | | | |
|--|-------------------------|---------------------------|------------------------|--------------|----------|
| Heat Exchanger: INTERC. VINO VINAZA (continued) | | | | | |
| Exchanger Design (End Point) | | | | | |
| Tube Side DeltaP: | 0.1000 bar * | Shell Side DeltaP: | 0.1000 bar * | Passes: | --- |
| UA: | 3.896e+006 kJ/C-h | Tolerance: | 1.0000e-04 * | | |
| Tube Side Data | | | Shell Side Data | | |
| Heat Transfer Coefficient | --- | Heat Transfer Coefficient | --- | | |
| Tube Pressure Drop | 0.10 bar * | Shell Pressure Drop | 0.10 bar * | | |
| Fouling | 0.00000 C-h-m2/kJ * | Fouling | 0.00000 C-h-m2/kJ * | | |
| Tube Length | 6.00 m * | Shell Passes | 1 | | |
| Tube O.D. | 28.30 mm * | Shell Series | 2 * | | |
| Tube Thickness | 1.5000 mm * | Shell Parallel | 1 * | | |
| Tube Pitch | 50.0000 mm * | Baffle Type | Single | | |
| Orientation | Horizontal | Baffle Cut(%Area) | 20.00 * | | |
| Passes Per Shell | 2 * | Baffle Orientation | Horizontal | | |
| Tubes Per Shell | 1100 * | Spacing | 800.0000 mm * | | |
| Layout Angle | Triangular (30 degrees) | Diameter | 1896.6030 mm * | | |
| TEMA Type | A E L | Area | 586.79 m2 | | |
| SPECS | | | | | |
| | Specified Value | Current Value | Relative Error | Active | Estimate |
| E-100 Heat Balance | 0.0000 kcal/h | 5.478e-008 kcal/h | -6.366e-011 | On | Off |
| E-100 UA | --- | 3.896e+006 kJ/C-h | --- | On | Off |
| Hyprotech Ltd. | | HYSYS v3.0.1 (Build 4602) | | Page 7 of 20 | |

| | | | | | |
|--|-----------|---------------------------|-------------------------|--------------------------------|--------------------|
| Heat Exchanger: INTERC. VINO VINAZA (continued) | | | | | |
| Detailed Specifications | | | | | |
| E-100 Heat Balance | | | | | |
| Type: Duty | | Pass: Error | | Spec Value: 0.0000 kcal/h | |
| E-100 UA | | | | | |
| Type: UA | | Pass: Overall | | Spec Value: --- | |
| User Variables | | | | | |
| RATING | | | | | |
| Sizing | | | | | |
| Overall Data | | | | | |
| Configuration | | | | | |
| # of Shells in Series | 2 * | Tube Passes per Shell | 2 * | Elevation (Base) | 0.0000 m |
| # of Shells in Parallel | 1 * | Exchange Orientation | Horizontal | First Tube Pass Flow Direction | Counter |
| TEMA Type: | | A | E | L | |
| Calculated Information | | | | | |
| Shell HT Coeff | --- | Overall U | 20 kJ/h-m2-C | Shell Vol per Shell | 12.80 m3 |
| Tube HT Coeff | --- | Overall UA | 3.896e+006 kJ/C-h | Tube DP | 0.1000 bar * |
| | | Tube Vol per Shell | 3.318 m3 | HT Area per Shell | 586.8 m2 |
| Shell Data | | | | | |
| Shell and Tube Bundle | | | | | |
| Shell Diameter | 1897 mm * | Tube Pitch | 50.00 mm * | Shell Fouling | 0.0000 C-h-m2/kJ * |
| # of Tubes per Shell | 1100 * | Tube Layout Angle | Triangular (30 degrees) | | |
| Hyprotech Ltd. | | HYSYS v3.0.1 (Build 4602) | | Page 8 of 20 | |

| Heat Exchanger: INTERC. VINO VINAZA (continued) | | | | | | | |
|---|--------------------|--------------------------|---------------|--------------------|----------|----------------|------------|
| Shell Baffles | | | | | | | |
| Shell Baffle Type | Single | Shell Baffle Orientation | Horizontal | Baffle Cut (%Area) | 20.00 * | Baffle Spacing | 800.0 mm * |
| Tube Data | | | | | | | |
| Dimensions | | | | | | | |
| OD | 28.30 mm * | ID | 25.30 mm * | Tube Thickness | 1.500 mm | Tube Length | 6.000 m * |
| Tube Properties | | | | | | | |
| Tube Fouling | 0.0000 C-h-m2/kJ * | Thermal Cond. | 45.00 W/m-K * | Wall Cp | --- | Wall Density | --- |
| PROPERTIES | | | | | | | |
| VINO A INTERC | | | | | | | |
| | Overall | Aqueous Phase | | | | | |
| Vapour/Phase Fraction | 0.0000 | 1.0000 | | | | | |
| Temperature: (C) | 25.00 * | 25.00 | | | | | |
| Pressure: (bar) | 1.100 * | 1.100 | | | | | |
| Molar Flow (kgmole/h) | 8389 | 8389 | | | | | |
| Mass Flow (kg/h) | 1.576e+005 | 1.576e+005 | | | | | |
| Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h) | 160.6 | 160.6 | | | | | |
| Molar Enthalpy (kcal/kgmole) | -6.805e+004 | -6.805e+004 | | | | | |
| Mass Enthalpy (kcal/kg) | -3622 | -3622 | | | | | |
| Molar Entropy (kJ/kgmole-C) | 7.797 | 7.797 | | | | | |
| Mass Entropy (kJ/kg-C) | 0.4150 | 0.4150 | | | | | |
| Heat Flow (kcal/h) | -5.708e+008 | -5.708e+008 | | | | | |
| Molar Density (kgmole/m3) | 53.18 | 53.18 | | | | | |
| Hyprotech Ltd. HYSYS v3.0.1 (Build 4602) Page 9 of 20 | | | | | | | |

| Heat Exchanger: INTERC. VINO VINAZA (continued) | | | | | | |
|--|-------------|---------------|--|--|--|--|
| VINO A INTERC | | | | | | |
| | Overall | Aqueous Phase | | | | |
| Mass Density (kg/m ³) | 999.0 | 999.0 | | | | |
| Std Ideal Liq Mass Density (kg/m ³) | 981.2 | 981.2 | | | | |
| Liq Mass Density @Std Cond (kg/m ³) | 1007 | 1007 | | | | |
| Molar Heat Capacity (kJ/kgmole-C) | 77.79 | 77.79 | | | | |
| Mass Heat Capacity (kJ/kg-C) | 4.141 | 4.141 | | | | |
| Thermal Conductivity (W/m-K) | 0.5933 | 0.5933 | | | | |
| Viscosity (cP) | 0.9305 | 0.9305 | | | | |
| Surface Tension (dyne/cm) | 70.73 | 70.73 | | | | |
| Molecular Weight | 18.79 | 18.79 | | | | |
| Z Factor | 8.344e-004 | 8.344e-004 | | | | |
| VINO A COLUMN A | | | | | | |
| | Overall | Aqueous Phase | | | | |
| Vapour/Phase Fraction | 0.0000 | 1.0000 | | | | |
| Temperature: (C) | 93.00 * | 93.00 | | | | |
| Pressure: (bar) | 1.000 | 1.000 | | | | |
| Molar Flow (kgmole/h) | 8389 | 8389 | | | | |
| Mass Flow (kg/h) | 1.576e+005 | 1.576e+005 | | | | |
| Std Ideal Liq Vol Flow (m ³ /h) | 160.6 | 160.6 | | | | |
| Molar Enthalpy (kJ/kgmole) | -6.678e+004 | -6.678e+004 | | | | |
| Mass Enthalpy (kcal/kg) | -3555 | -3555 | | | | |
| Hyprotech Ltd. HYSYS v3.0.1 (Build 4602) Page 10 of 20 | | | | | | |

| Heat Exchanger: INTERC. VINO VINAZA (continued) | | | | | | |
|--|-------------|---------------|--|--|--|--|
| VINO A COLUMN A | | | | | | |
| | Overall | Aqueous Phase | | | | |
| Molar Entropy (kJ/kgmole-C) | 24.52 | 24.52 | | | | |
| Mass Entropy (kJ/kg-C) | 1.305 | 1.305 | | | | |
| Heat Flow (kcal/h) | -5.602e+008 | -5.602e+008 | | | | |
| Molar Density (kgmole/m ³) | 50.27 | 50.27 | | | | |
| Mass Density (kg/m ³) | 944.4 | 944.4 | | | | |
| Std Ideal Liq Mass Density (kg/m ³) | 981.2 | 981.2 | | | | |
| Liq Mass Density @Std Cond (kg/m ³) | 1007 | 1007 | | | | |
| Molar Heat Capacity (kJ/kgmole-C) | 78.08 | 78.08 | | | | |
| Mass Heat Capacity (kJ/kg-C) | 4.156 | 4.156 | | | | |
| Thermal Conductivity (W/m-K) | 0.6559 | 0.6559 | | | | |
| Viscosity (cP) | 0.3141 | 0.3141 | | | | |
| Surface Tension (dyne/cm) | 58.72 | 58.72 | | | | |
| Molecular Weight | 18.79 | 18.79 | | | | |
| Z Factor | 6.534e-004 | 6.534e-004 | | | | |
| VINAZA CALIENTE | | | | | | |
| | Overall | Aqueous Phase | | | | |
| Vapour/Phase Fraction | 0.0000 | 1.0000 | | | | |
| Temperature: (C) | 109.2 | 109.2 | | | | |
| Pressure: (bar) | 1.400 | 1.400 | | | | |
| Molar Flow (kgmole/h) | 7685 | 7685 | | | | |
| Hyprotech Ltd. HYSYS v3.0.1 (Build 4602) Page 11 of 20 | | | | | | |

Heat Exchanger: INTERC. VINO VINAZA (continued)

| VINAZA CALIENTE | | | | | |
|------------------------------------|-------------|---------------|--|--|--|
| | Overall | Aqueous Phase | | | |
| Mass Flow (kg/h) | 1.385e+005 | 1.385e+005 | | | |
| Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h) | 138.8 | 138.8 | | | |
| Molar Enthalpy (kcal/kgmole) | -6.657e+004 | -6.657e+004 | | | |
| Mass Enthalpy (kcal/kg) | -3693 | -3693 | | | |
| Molar Entropy (kJ/kgmole-C) | 25.46 | 25.46 | | | |
| Mass Entropy (kJ/kg-C) | 1.413 | 1.413 | | | |
| Heat Flow (kcal/h) | -5.116e+008 | -5.116e+008 | | | |
| Molar Density (kgmole/m3) | 52.15 | 52.15 | | | |
| Mass Density (kg/m3) | 940.0 | 940.0 | | | |
| Std Ideal Liq Mass Density (kg/m3) | 997.8 | 997.8 | | | |
| Liq Mass Density @Std Cond (kg/m3) | 1015 | 1015 | | | |
| Molar Heat Capacity (kJ/kgmole-C) | 75.83 | 75.83 | | | |
| Mass Heat Capacity (kJ/kg-C) | 4.207 | 4.207 | | | |
| Thermal Conductivity (W/m-K) | 0.6840 | 0.6840 | | | |
| Viscosity (cP) | 0.2542 | 0.2542 | | | |
| Surface Tension (dyne/cm) | 56.83 | 56.83 | | | |
| Molecular Weight | 18.02 | 18.02 | | | |
| Factor | 8.444e-004 | 8.444e-004 | | | |

Hyprotech Ltd.

HYSYS v3.0.1 (Build 4602)

Page 12 of 20

Heat Exchanger: INTERC. VINO VINAZA (continued)

| VINAZA FRIA | | | | | |
|------------------------------------|-------------|---------------|--|--|--|
| | Overall | Aqueous Phase | | | |
| Vapour/Phase Fraction | 0.0000 | 1.0000 | | | |
| Temperature (C) | 32.71 | 32.71 | | | |
| Pressure (bar) | 1.300 | 1.300 | | | |
| Molar Flow (kgmole/h) | 7685 | 7685 | | | |
| Mass Flow (kg/h) | 1.385e+005 | 1.385e+005 | | | |
| Std Ideal Liq Vol Flow (m3/h) | 138.8 | 138.8 | | | |
| Molar Enthalpy (kcal/kgmole) | -6.795e+004 | -6.795e+004 | | | |
| Mass Enthalpy (kcal/kg) | -3770 | -3770 | | | |
| Molar Entropy (kJ/kgmole-C) | 8.526 | 8.526 | | | |
| Mass Entropy (kJ/kg-C) | 0.4731 | 0.4731 | | | |
| Heat Flow (kcal/h) | -5.222e+008 | -5.222e+008 | | | |
| Molar Density (kgmole/m3) | 55.56 | 55.56 | | | |
| Mass Density (kg/m3) | 1001 | 1001 | | | |
| Std Ideal Liq Mass Density (kg/m3) | 997.8 | 997.8 | | | |
| Liq Mass Density @Std Cond (kg/m3) | 1015 | 1015 | | | |
| Molar Heat Capacity (kJ/kgmole-C) | 76.16 | 76.16 | | | |
| Mass Heat Capacity (kJ/kg-C) | 4.226 | 4.226 | | | |
| Thermal Conductivity (W/m-K) | 0.6220 | 0.6220 | | | |
| Viscosity (cP) | 0.7530 | 0.7530 | | | |
| Surface Tension (dyne/cm) | 70.75 | 70.75 | | | |
| Molecular Weight | 18.02 | 18.02 | | | |

Hyprotech Ltd.

HYSYS v3.0.1 (Build 4602)

Page 13 of 20

Heat Exchanger: INTERC. VINO VINAZA (continued)

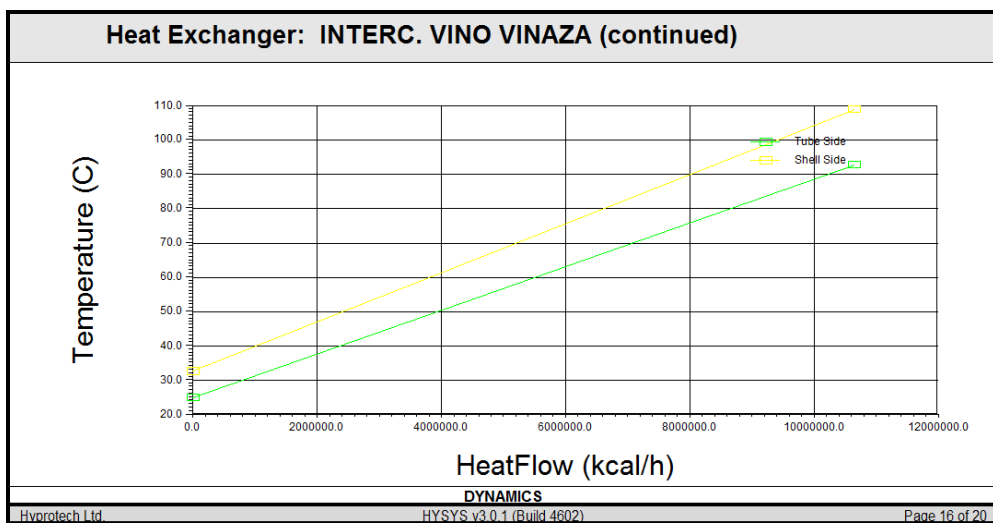
| VINAZA FRIA | | | | | |
|------------------------------|------------------|----------------|------------------|------------------|-----------------|
| | Overall | Aqueous Phase | | | |
| Z Factor | 9.201e-004 | 9.201e-004 | | | |
| Stream Properties | | | | | |
| | VINO A INTERC | VINO A COLUMNA | VINAZA CALIENTE | VINAZA FRIA | |
| Vapour Fraction | 0.0000 | 0.0000 | 0.0000 | 0.0000 | |
| Temperature | 25.00 * | 93.00 * | 109.2 | 32.71 | |
| Pressure | 1.100 * | 1.000 | 1.400 | 1.300 | |
| Enthalpy | -6.805e+004 | -6.678e+004 | -6.657e+004 | -6.795e+004 | |
| Molar Flow | 8389 | 8389 | 7685 | 7685 | |
| Mass Flow | 1.576e+005 | 1.576e+005 | 1.385e+005 | 1.385e+005 | |
| Std Ideal Liq Vol Flow | 160.6 | 160.6 | 138.8 | 138.8 | |
| Heat Flow | -5.708e+008 | -5.602e+008 | -5.116e+008 | -5.222e+008 | |
| DETAILS | | | | | |
| Overall/Detailed Performance | | | | | |
| Duty: | 1.065e+07 kcal/h | UA: | 3.896e+06 kJ/C-h | UA Curv. Error: | 0.00e-01 kJ/C-h |
| Heat Leak: | 0.000e-01 kcal/h | Min. Approach: | 7.706 C | Hot Pinch Temp: | 32.71 C |
| Heat Loss: | 0.000e-01 kcal/h | Lmt: | 11.44 C | Cold Pinch Temp: | 25.00 C |
| Ft Factor: --- | | | | | |
| Uncorrected Lmt: --- | | | | | |
| TABLES | | | | | |

Hyprotech Ltd.

HYSYS v3.0.1 (Build 4602)

Page 14 of 20

| Heat Exchanger: INTERC. VINO VINAZA (continued) | | | | | |
|--|----------------|--------------------|------------------------|----------------|---------------|
| Shell Side | | | | | |
| Temperature (C) | Pressure (bar) | Heat Flow (kcal/h) | Enthalpy (kcal/kgmole) | Molar Vap Frac | Mass Vap Frac |
| 32.71 | 1.30 | 0.00 | -67952.49 | 0.0000 | 0.0000 |
| 109.23 | 1.40 | 10654855.56 | -66566.05 | 0.0000 | 0.0000 |
| Tube Side | | | | | |
| Temperature (C) | Pressure (bar) | Heat Flow (kcal/h) | Enthalpy (kcal/kgmole) | Molar Vap Frac | Mass Vap Frac |
| 25.00 | 1.10 | 0.00 | -68049.12 | 0.0000 | 0.0000 |
| 93.00 | 1.00 | 10654855.56 | -66778.97 | 0.0000 | 0.0000 |
| Heat Flow vs Temp | | | | | |
| | | | | | |
| Hyprotech Ltd. HYSYS v3.0.1 (Build 4602) Page 15 of 20 | | | | | |



| Heat Exchanger: INTERC. VINO VINAZA (continued) | | | | |
|---|----------|------------|---------------------------|--|
| DYNAMICS | | | | |
| Basic Model | | | | |
| Model Parameters | | | | |
| Tube Volume | (m3) | 0.1000 | Shell UA | (kg/h) --- |
| Shell Volume | (m3) | 0.1000 | Tube UA | (kg/h) --- |
| Elevation | (m) | 0.0000 | Minimum Flow Scale Factor | 0.0000 * |
| Overall UA | (kJ/C-h) | 3.896e+006 | | |
| Summary | | | | |
| Shell Duty: --- | | | Tube Duty: --- | |
| Pressure Flow Specifications | | | | |
| Shell Side Specification | | | | |
| Delta P | (bar) | 0.1000 * | Active | k kg/hr/sqrt(bar-kg/m3) --- Not Active |
| Tube Side Specifications | | | | |
| Delta P | (bar) | 0.1000 * | Active | k kg/hr/sqrt(bar-kg/m3) --- Not Active |
| Holdup | | | | |
| Shell Holdup | | | | |
| Hyprotech Ltd | | | | |
| HYSYS v3.0.1 (Build 4602) | | | | |
| Page 17 of 20 | | | | |

| Heat Exchanger: INTERC. VINO VINAZA (continued) | | | |
|---|----------------------------|-------------------|----------------|
| Phase | Accumulation (kgmole/h) | Moles (kgmole) | Volume (m3) |
| Vapour | 0.0000 | 0.0000 * | 0.0000 |
| Liquid | 0.0000 | 0.0000 * | 0.0000 |
| Aqueous | 0.0000 | 0.0000 * | 0.0000 |
| Total | 0.0000 | 0.0000 | 0.0000 |
| Tube Holdup | | | |
| Phase | Accumulation (kgmole/h) | Moles (kgmole) | Volume (m3) |
| Vapour | 0.0000 | 0.0000 * | 0.0000 |
| Liquid | 0.0000 | 0.0000 * | 0.0000 |
| Aqueous | 0.0000 | 0.0000 * | 0.0000 |
| Total | 0.0000 | 0.0000 | 0.0000 |
| NOTES | | | |
| | | | |
| | | | |
| | | | |

Hyprotech Ltd

HYSYS v3.0.1 (Build 4602)

Page 18 of 20

| Workbook: COL. MOSTERA (COL1) | | | | | |
|-------------------------------|-------------------|---------------------------|--------------|-------------------|--------------|
| Material Streams | | | | | |
| Name | Reflux @COL1 | To Condenser @COL | Boilup @COL1 | To Reboiler @COL1 | FLEGMA @COL1 |
| Vapour Fraction | 0.0000 | 1.0000 | 1.0000 | 0.0000 | 0.0000 |
| Temperature (C) | 80.91 | 92.74 | 109.2 | 106.9 | 80.91 |
| Pressure (bar) | 1.000 | 1.100 | 1.400 | 1.300 | 1.000 |
| Molar Flow (kgmole/h) | 351.8 | 1055 | 1251 | 9936 | 703.6 |
| Mass Flow (kg/h) | 9535 | 2.860e+004 | 2.265e+004 | 1.612e+005 | 1.907e+004 |
| Liquid Volume Flow (m3/h) | 10.89 | 32.67 | 22.75 | 161.6 | 21.78 |
| Heat Flow (kcal/h) | -2.329e+007 | -5.952e+007 | -7.124e+007 | -5.952e+008 | -4.658e+007 |
| Name | VINAZA CALIENTE @ | VINO A COLUMNA @ | | | |
| Vapour Fraction | 0.0000 | 0.0000 | | | |
| Temperature (C) | 109.2 | 93.00 | | | |
| Pressure (bar) | 1.400 | 1.000 | | | |
| Molar Flow (kgmole/h) | 7685 | 8389 | | | |
| Mass Flow (kg/h) | 1.385e+005 | 1.576e+005 | | | |
| Liquid Volume Flow (m3/h) | 138.8 | 160.6 | | | |
| Heat Flow (kcal/h) | -5.116e+008 | -5.602e+008 | | | |
| Compositions | | | | | |
| Name | Reflux @COL1 | To Condenser @COL | Boilup @COL1 | To Reboiler @COL1 | FLEGMA @COL1 |
| Comp Mole Frac (Ethanol) | 0.3239 | 0.3239 | 0.0034 | 0.0007 | 0.3239 |
| Comp Mole Frac (H2O) | 0.6761 | 0.6761 | 0.9966 | 0.9993 | 0.6761 |
| Hyprotech Ltd. | | HYSYS v3.0.1 (Build 4602) | | Page 19 of 20 | |

| Workbook: COL. MOSTERA (COL1) (continued) | | | | | |
|---|-------------------|----------------------|-----------------------|---------|-------------|
| Compositions (continued) | | | | | |
| Name | VINAZA CALIENTE @ | VINO A COLUMNA @ | | | |
| Comp Mole Frac (Ethanol) | 0.0003 | 0.0275 | | | |
| Comp Mole Frac (H2O) | 0.9997 | 0.9725 | | | |
| Energy Streams | | | | | |
| Name | CONDENS @COL1 | QRE @COL1 | | | |
| Heat Flow (kcal/h) | 1.034e+007 | 1.239e+007 | | | |
| Unit Ops | | | | | |
| Operation Name | Operation Type | Feeds | Products | Ignored | Calc. Level |
| Reboiler @COL1 | Reboiler | To Reboiler @COL1 | VINAZA CALIENTE @COL1 | No | 500.0 |
| | | QRE @COL1 | Boilup @COL1 | | |
| | | Reflux @COL1 | To Reboiler @COL1 | | |
| Main TS @COL1 | Tray Section | Boilup @COL1 | To Condenser @COL1 | No | 500.0 |
| | | VINO A COLUMNA @COL1 | | | |
| | | To Condenser @COL1 | FLEGMA @COL1 | | |
| Condenser @COL1 | Total Condenser | CONDENS @COL1 | Reflux @COL1 | No | 500.0 |
| | | | CONDENS @COL1 | | |
| | | | | | |
| Hvrotech Ltd. HYSYS v3.0.1 (Build 4602) Page 20 of 20 | | | | | |

